

**MODELADO Y SIMULACIÓN DE UN SISTEMA DE MUESTREO COMPRESIVO
DE SEÑALES DE RESONANCIA MAGNÉTICA**

MIGUEL ALBERTO CALDERÓN BUITRAGO

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE INGENIERÍAS FÍSICO-MECÁNICAS
ESCUELA DE INGENIERÍA DE SISTEMAS E INFORMÁTICA
BUCARAMANGA**

2017

**MODELADO Y SIMULACIÓN DE UN SISTEMA DE MUESTREO COMPRESIVO
DE SEÑALES DE RESONANCIA MAGNÉTICA**

MIGUEL ALBERTO CALDERÓN BUITRAGO

**Trabajo de grado para optar por título de:
Ingeniero de Sistemas**

Director:

HENRY ARGUELLO FUENTES

Ingeniero Electricista, PhD

Codirector:

ÓSCAR JAVIER ESPITIA MENDOZA

Ingeniero de Sistemas, MS(c)

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE INGENIERÍAS FÍSICO-MECÁNICAS
ESCUELA DE INGENIERÍA DE SISTEMAS E INFORMÁTICA
BUCARAMANGA**

2017

CONTENIDO

	Pág.
INTRODUCCIÓN	14
1. ESTADO DEL ARTE RESONANCIA MAGNÉTICA.....	16
1.1 RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR.....	16
1.2 PRINCIPIO FÍSICO DE RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR.....	17
1.2.1 Espín nuclear y momento angular.	17
1.2.2 Comportamiento del espín en un campo magnético.....	18
1.2.3 Precesión y frecuencia de Larmor.	21
1.2.4 Proceso de relajación.	22
1.3 ESPECTROSCOPIA DE RMN.....	24
1.3.1 Descripción de los equipos de RMN.	24
1.4 RMN MULTIDIMENSIONAL	26
1.4.1 Esquemas experimentales para las técnicas de RMN-2D.....	30
2. MUESTREO COMPRESIVO	32
2.1 BAJA DENSIDAD.	32
2.2 MUESTREO INCOHERENTE.....	34
2.3 RECONSTRUCCIÓN.....	35
3. MUESTREO COMPRESIVO EN RESONANCIA MAGNÉTICA.....	36
3.1 DISPERSIÓN EN SEÑALES DE RESONANCIA MAGNÉTICA.....	38
3.2 DISEÑO DE LAS MATRICES DE SUBMUESTREO.	39
3.3 RECONSTRUCCIÓN DEL ESPECTRO.	41
4. SIMULACIONES Y RESULTADOS	42
5. SIMULACIÓN Y RESULTADOS CON DATOS DE LABORATORIO	57
6. CONCLUSIONES	64
REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	65
BIBLIOGRAFÍA.....	68

LISTA DE TABLAS

	Pág.
Tabla 1. Valores de J según el número de protones y neutrones del núcleo.	17
Tabla 2. Propiedades magnéticas de algunos núcleos.	18
Tabla 3. Errores de reconstrucción para la matriz identidad como base de representación dispersa.	42
Tabla 4. Errores de reconstrucción para la base DCT.	43
Tabla 5. Errores de reconstrucción para la base Wavelet.	43
Tabla 6. Comparación de los errores promedios para cada una de las bases de representación dispersa.	43
Tabla 7. Comparación de los errores para cada una de las tasas de submuestreo propuestas de los 6 experimentos simulados.	44
Tabla 8. Comparación de los errores para cada una de las cantidades de ruido propuestas para los cuatro experimentos seleccionados.	52
Tabla 9. Comparación de los errores de los 6 experimentos para cada una de las tasas de submuestreo.	57

LISTA DE DIAGRAMAS

Pág.

Diagrama 1. Proceso para la obtención de un espectro bidimensional.....	28
--	----

LISTA DE ALGORITMOS

Pág.

Algoritmo 1. Diagrama de flujo del algoritmo utilizado para la simulación.....41

LISTA DE FIGURAS

Pág.

Figura 1. Ilustraciones adquiridas con técnicas de NMR. (a) Espectro de MNR de una molécula de hidrogeno en un compuesto. (b) Imágenes adquiridas por NMR.	16
Figura 2. Orientaciones del espín con $J = 1/2$	19
Figura 3. Comportamiento del núcleo cuando es sometido a un campo magnético.	19
Figura 4. Maneras de obtener el espectro de resonancia magnética. (a) Barrido de frecuencia de los fotones. (b) Barrido de campo magnético.	20
Figura 5. Núcleo de espín cuyo momento magnético μ forma un ángulo θ con el campo estático B_0 (el ángulo no puede tomar un valor cualquiera pues está cuantizado: $\cos \theta = \frac{m}{J}$).	21
Figura 6. Movimiento de precesión descrito por el núcleo.	22
Figura 7. Esquema de un sistema de muestreo de señales de resonancia magnética.	25
Figura 8. Ejemplo simplificado del formato general con una secuencia básica COSY-90	28
Figura 9. Ejemplo gráfico del proceso para la obtención del espectro de NMR 2D.	29
Figura 10. Secuencia de pulsos para los experimentos (a) COSY y (b) TOCSY.	31
Figura 11. Submuestreo lineal $y = \Phi f$	33
Figura 12. Muestreo compresivo, y es el vector de proyecciones, Φ es la matriz de medición, f es la señal original, Ψ es alguna base de representación dispersa y x es el vector de coeficientes dispersos.	34
Figura 13. Ejemplo de submuestreo aleatorio en la dimensión indirecta.	38
Figura 14. Matrices de submuestreo utilizadas para la reconstrucción del espectro.	40
Figura 15. Experimento HMBC con matriz de submuestreo c . (a) Espectro original. (b) Espectro reconstruido 25%. (c) Espectro reconstruido 35%. (d) Espectro reconstruido 45%. (e) Espectro reconstruido 55%. (f) Espectro reconstruido 65%.	46
Figura 16. Experimento HSQC con matriz de submuestreo c . (a) Espectro original. (b) Espectro reconstruido 25%. (c) Espectro reconstruido 35%. (d) Espectro	

reconstruido 45%. (e) Espectro reconstruido 55%. (f) Espectro reconstruido 65%.	47
Figura 17. Experimentos HMBC con matriz de submuestreo c. (a) Espectro original. (b) Espectro reconstruido 25%. (c) Espectro reconstruido 35%. (d) Espectro reconstruido 45%. (e) Espectro reconstruido 55%. (f) Espectro reconstruido 65%.	48
Figura 18. Experimento JRES con matriz de submuestreo c. (a) Espectro original. (b) Espectro reconstruido 25%. (c) Espectro reconstruido 35%. (d) Espectro reconstruido 45%. (e) Espectro reconstruido 55%. (f) Espectro reconstruido 65%.	49
Figura 19. Experimento COSY con matriz de submuestreo c. (a) Espectro original. (b) Espectro reconstruido 25%. (c) Espectro reconstruido 35%. (d) Espectro reconstruido 45%. (e) Espectro reconstruido 55%. (f) Espectro reconstruido 65%.	50
Figura 20. Experimento TOCSY con matriz de submuestreo c. (a) Espectro original. (b) Espectro reconstruido 25%. (c) Espectro reconstruido 35%. (d) Espectro reconstruido 45%. (e) Espectro reconstruido 55%. (f) Espectro reconstruido 65%.	51
Figura 21. Experimento HMBC con ruido. (a) Espectro original. (b) Espectro reconstruido con snr=5. (c) Espectro reconstruido con snr=10. (d) Espectro reconstruido con snr=20. (e) Espectro reconstruido con snr=30.	53
Figura 22. Experimento HSQC con ruido. (a) Espectro original. (b) Espectro reconstruido con snr=5. (c) Espectro reconstruido con snr=10. (d) Espectro reconstruido con snr=20. (e) Espectro reconstruido con snr=30.	54
Figura 23. Experimento COSY con ruido. (a) Espectro original. (b) Espectro reconstruido con snr=5. (c) Espectro reconstruido con snr=10. (d) Espectro reconstruido con snr=20. (e) Espectro reconstruido con snr=30.	55
Figura 24. Experimento TOCSY con ruido. (a) Espectro original. (b) Espectro reconstruido con snr=5. (c) Espectro reconstruido con snr=10. (d) Espectro reconstruido con snr=20. (e) Espectro reconstruido con snr=30.	56
Figura 25. Molécula A, experimento COSY. (a) Espectro original. (b) Espectro reconstruido 25%. (c) Espectro reconstruido 35%. (d) Espectro reconstruido 45%. (e) Espectro reconstruido 55%. (f) Espectro reconstruido 65%.	58
Figura 26. Molécula A, experimento HMBC. (a) Espectro original. (b) Espectro reconstruido 25%. (c) Espectro reconstruido 35%. (d) Espectro reconstruido 45%. (e) Espectro reconstruido 55%. (f) Espectro reconstruido 65%.	59
Figura 27. Molécula A, experimento HSQC. (a) Espectro original. (b) Espectro reconstruido 25%. (c) Espectro reconstruido 35%. (d) Espectro reconstruido 45%. (e) Espectro reconstruido 55%. (f) Espectro reconstruido 65%.	60

Figura 28. Molécula B, experimento COSY. (a) Espectro original. (b) Espectro reconstruido 25%. (c) Espectro reconstruido 35%. (d) Espectro reconstruido 45%. (e) Espectro reconstruido 55%. (f) Espectro reconstruido 65%.61

Figura 29. Molécula B, experimento HMBC. (a) Espectro original. (b) Espectro reconstruido 25%. (c) Espectro reconstruido 35%. (d) Espectro reconstruido 45%. (e) Espectro reconstruido 55%. (f) Espectro reconstruido 65%.62

Figura 30. Molécula B, experimento HSQC. (a) Espectro original. (b) Espectro reconstruido 25%. (c) Espectro reconstruido 35%. (d) Espectro reconstruido 45%. (e) Espectro reconstruido 55%. (f) Espectro reconstruido 65%.63

RESUMEN

TITULO: MODELADO Y SIMULACIÓN DE UN SISTEMA DE MUESTREO COMPRESIVO DE SEÑALES DE RESONANCIA MAGNÉTICA*

AUTOR: MIGUEL ALBERTO CALDERÓN BUITRAGO**

PALABRAS CLAVE: Resonancia magnética nuclear, Muestreo Compresivo, Dispersión, Espectroscopia.

La resonancia magnética nuclear (NMR, de su sigla en inglés) es una técnica para obtener información de la estructura molecular de los objetos, basada en el fenómeno físico de MR. Algunos núcleos atómicos sometidos a un campo magnético externo absorben radiación electromagnética en la región de las radiofrecuencias. Como la frecuencia exacta de absorción depende del entorno de estos núcleos, se puede emplear para determinar la estructura de las moléculas a las que pertenecen. Por otro lado, el muestreo compresivo (CS, de su sigla en inglés) es una teoría que permite muestreo y compresión simultánea mediante la codificación de las medidas antes de ser integradas en los sensores. Los algoritmos de reconstrucción basados en CS permiten la recuperación de señales submuestreadas, por esta razón, CS se considera un método prometedor para reducir los tiempos de adquisición en MR.

CS se basa en dos principios, la dispersión y el muestreo incoherente. La dispersión permite la compresión de la señal y la incoherencia permite que la energía de la señal se distribuya en todo el dominio de muestreo. Algunos trabajos de investigación se han enfocado en el desarrollo de modelos, específicamente, en la aplicación de CS en MR. Sin embargo, no se ha estudiado la reducción de tiempos de adquisición por medio de representaciones dispersas adecuadas implementando CS en NMR. Con este proyecto se pretende determinar el modelo matemático del proceso de muestreo compresivo y las bases de representación dispersa de señales de resonancia magnética con el objetivo de reducir el tiempo de adquisición sin comprometer la calidad de las reconstrucciones. Para evaluar los resultados, se plantea el desarrollo de algoritmos para realizar simulaciones numéricas con una base de datos que se construirá a partir los datos adquiridos en el Laboratorio de resonancia magnética nuclear de la Universidad Industrial de Santander.

* Trabajo de investigación.

** Facultad de Ingenierías Físico-mecánicas. Escuela de Ingeniería de Sistemas e Informática.
Director: PhD. Henry Arguello Fuentes. Codirector: MS(c). Óscar Javier Espitia Mendoza.

ABSTRACT

TITLE: MODELING AND SIMULATION OF A COMPRESSIVE SAMPLING PROCEDURE FOR MAGNETIC RESONANCE SIGNALS.*

AUTHOR: MIGUEL ALBERTO CALDERÓN BUITRAGO**

KEYWORDS: Nuclear magnetic resonance, Compressive sampling, Sparsity, Spectroscopy.

Nuclear magnetic resonance (NMR) is a technique for obtaining information of the molecular structure of an object, based on the physical phenomenon of MR. Some atomic nucleus take up electromagnetic radiation under an external magnetic field in the region of radio frequencies. Since the exact frequency of absorption depends on the environment of these nucleus, it can be used to determine the structure of the molecules to which they belong.

On the other hand, compressive sampling (CS) is a theory that allows simultaneous sampling and compression by encoding the measures before being integrated into the sensors. Reconstruction algorithms based on CS allow the recovery of undersampled signals, for this reason, CS is considered a promising method for reducing acquisition times in MR. CS is based on two principles, sparsity and incoherent sampling. The dispersion allows compression of the signal and incoherence allows the signal energy to be distributed throughout the sampling domain.

Some works has been focused on developing models for sampling applying CS in MR. However, reducing acquisition times by using suitable sparse representations implementing CS in NMR has not been studied. This project aims to determine the mathematical model of the process of compressive sampling and sparse representation basis of magnetic resonance signals in order to reduce the acquisition time without sacrificing the quality of the reconstructions. To evaluate the results, the development of algorithms is proposed to perform numerical simulations with a database that is built from data acquired at Laboratorio de resonancia magnética nuclear of the Universidad Industrial de Santander.

* Research work.

** Faculty of Physical-mechanics. Systems engineering and informatics school.

Advisor: PhD. Henry Arguello Fuentes. Co-advisor: MS(c). Óscar Javier Espitia Mendoza.

INTRODUCCIÓN

La resonancia magnética (MR, de su sigla en inglés) es la absorción o emisión de radiación electromagnética de electrones o núcleos atómicos en respuesta a la aplicación de ciertos campos magnéticos. Los principios de resonancia magnética son aplicados en laboratorios para analizar las propiedades atómicas y nucleares de la materia. MR se ha establecido como una técnica de escaneo no invasivo aplicada en áreas como la medicina, geología y la industria [1], [2].

El proceso de escaneo por NMR consiste en aplicar una secuencia de pulsos electromagnéticos al objeto bajo estudio, al final de este proceso se archiva la información del decaimiento inducido libre (FID, de su sigla en inglés) [3]. Es necesario repetir los escaneos para disminuir la relación señal a ruido (S/N) y, en el caso de núcleos con baja sensibilidad o baja abundancia, es necesario repetir cientos o miles de veces la secuencia de pulsos. Un problema latente en este procedimiento es que la adquisición de los datos es un proceso considerablemente lento, lo que puede perjudicar la calidad de las reconstrucciones. Con la reducción en tiempos de adquisición, además de disminuir el ruido, se reducen los costos del procedimiento [4].

Por otro lado, el muestreo compresivo (CS, de su sigla en inglés) es una teoría que permite muestreo y compresión simultánea mediante la codificación de las medidas antes de ser integradas en los sensores. Los algoritmos de reconstrucción basados en CS permiten la recuperación de señales submuestreadas, por esta razón, CS se considera un método prometedor para reducir los tiempos de adquisición en MR. CS se basa en dos principios, la dispersión y el muestreo incoherente. La dispersión permite la compresión de la señal y la incoherencia permite que la energía de la señal se distribuya en todo el dominio de muestreo [5].

Algunos trabajos de investigación se han enfocado en el desarrollo de modelos para la reconstrucción en la aplicación de CS en MR [6], [7], [8]. Sin embargo, no se ha estudiado la reducción de tiempos de adquisición por medio de representaciones dispersas adecuadas implementando CS en NMR. Con este proyecto se pretende determinar el modelo matemático del proceso de muestreo compresivo y las bases de representación dispersa de imágenes de resonancia magnética con el objetivo de reducir el tiempo de adquisición sin comprometer la calidad de las reconstrucciones. Para evaluar los resultados, se plantea el desarrollo de algoritmos para realizar simulaciones numéricas con una base de

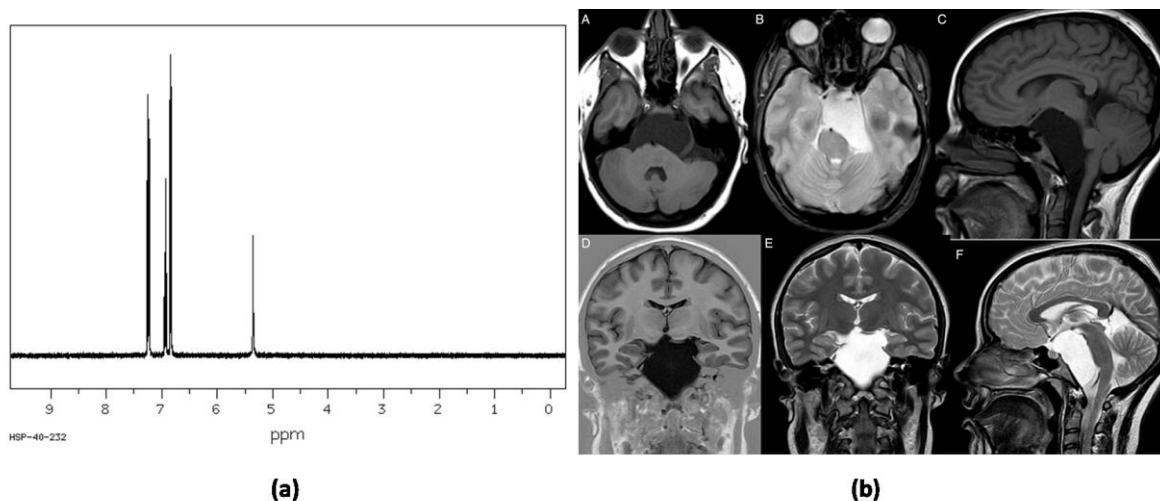
datos que se construirá a partir los datos adquiridos en el Laboratorio de resonancia magnética nuclear de la Universidad Industrial de Santander.

1. ESTADO DEL ARTE RESONANCIA MAGNÉTICA

1.1 RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR

La resonancia magnética nuclear (NMR, de su sigla en inglés) es una técnica para obtener información de la estructura molecular de los objetos, basada en el fenómeno físico de MR. Algunos núcleos atómicos sometidos a un campo magnético externo absorben radiación electromagnética en la región de las radiofrecuencias. Como la frecuencia exacta de absorción depende del entorno de estos núcleos, se puede emplear para determinar la estructura de las moléculas a las que pertenecen. Este procedimiento es útil, por ejemplo, en la determinación de la estructura de proteínas en disolución y entre otras importantes aplicaciones, en la Figura 1 se muestra algunos resultados de las técnicas que utilizan NMR [9].

Figura 1. Ilustraciones adquiridas con técnicas de NMR. (a) Espectro de MNR de una molécula de hidrogeno en un compuesto. (b) Imágenes adquiridas por NMR.



- (a) [Fuente] [En línea] Disponible en <http://www.liceoagb.es/quimiorg/imagenes/rmnfenol2.gif>
(b) [Fuente] [En línea] Disponible en http://www.elsevier.es/ficheros/publicaciones/11301473/0000002600000006/v1_201511060056/S1130147315000329/v1_201511060056/es/main.assets/gr2.jpeg

1.2 PRINCIPIO FÍSICO DE RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR

1.2.1 Espín nuclear y momento angular.

Los núcleos atómicos están formados por protones y neutrones. Ambos nucleones tienen momento orbital y momento angular de espín (protones y neutrones tienen espín 1/2). El giro orbital del electrón representa una corriente y tiene un momento magnético asociado. El giro del electrón y del protón sobre si mismos (espín) también tiene asociado un momento magnético.

El momento magnético asociado a un momento angular dado es:

$$\mu = \gamma J , \quad (1)$$

donde μ es el momento magnético, J es el momento angular y γ es la razón giro magnética.

El valor del espín nuclear, J , no se puede predecir exactamente, pero existen reglas que permiten relacionar su magnitud con el número de protones y neutrones presentes en el núcleo [10], como se describe en la Tabla 1.

Tabla 1. Valores de J según el número de protones y neutrones del núcleo.

Número de protones	Número de neutrones	Valores de J
Par	Par	0
Impar	Impar	Entero (1, 2, 3, ...)
Par	Impar	Semi entero (1/2, 3/2, 5/2, ...)
Impar	Par	(1/2, 3/2, 5/2, ...)

[Fuente]Departamento de Química y Física., "Resonancia magnética nuclear," vol. 1, pp. 1–36, 2012.

Todos los núcleos tienen unas propiedades magnéticas establecidas cuyos valores se calculan en laboratorio y no cambian, estos valores se establecen en la Tabla 2.

Tabla 2. Propiedades magnéticas de algunos núcleos.

Núcleo	Espín	$\gamma 10^7 (\text{Ts})^{-1}$	$\nu (\text{MHz})$	Abundancia Natural	Sensibilidad Relativa
^1H	1/2	26.75	400	99.985	1
^2D	1	4.11	61.4	0.015	0.009
^{13}C	1/2	6.73	100.6	1.108	0.0159
^{14}N	1	1.93	28.8	99.63	0.001
^{15}N	1/2	-2.71	40.5	0.37	0.001
^{17}O	5/2	-3.63	54.3	0.037	-----
^{19}F	1/2	25.18	376.5	100	0.834
^{29}Si	1/2	-5.32	79.6	4.7	0.079
^{31}P	1/2	10.84	162.1	100	0.066

[Fuente] Departamento de Química y Física., "Resonancia magnética nuclear," vol. 1, pp. 1–36, 2012.

1.2.2 Comportamiento del espín en un campo magnético.

Dependiendo del valor del momento angular se puede obtener $2J+1$ orientaciones del espín, por lo tanto, considerando un núcleo que posee un espín $1/2$ como ^1H , ^{13}C o ^{19}F se obtienen dos estados posibles de espín: $m=1/2$ o $m=-1/2$, como se ilustra en la Figura 2. Las energías de estos dos estados son las mismas, por consiguiente, el número atómico de los dos estados serán aproximadamente iguales.

A cada una de esas orientaciones le corresponde una energía potencial de valor:

$$E = \mu \times B_0 \cos \theta, \quad (2)$$

donde μ es el momento magnético, B_0 es la fuerza del campo aplicado y θ el ángulo que el eje de rotación del núcleo forma con la dirección del campo aplicado, como se ilustra en la Figura 3[11].

Figura 2. Orientaciones del espín con $J = 1/2$.

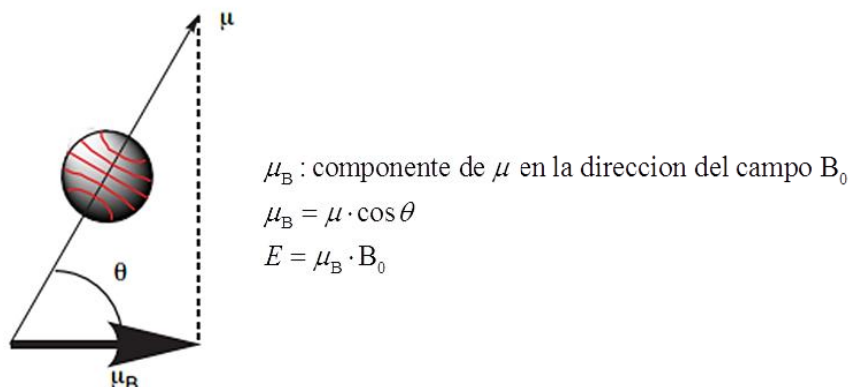
$$m = \frac{1}{2} \quad \theta = 0^\circ \quad E = \mu B_0$$

$$m = -\frac{1}{2} \quad \theta = 180^\circ \quad E = -\mu B_0$$



[Fuente] E.- Madrid, D. De Química, F. De Ciencias, and S. Rey, "RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR DE PROTÓN :," pp. 1–47.

Figura 3. Comportamiento del núcleo cuando es sometido a un campo magnético.



[Fuente] E.- Madrid, D. De Química, F. De Ciencias, and S. Rey, "RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR DE PROTÓN" pp. 1–47.

Al someter el núcleo a un campo magnético, la interacción entre el momento magnético y el campo magnético externo provoca que los dos estados de espín dejen de tener la misma energía.

El principio para obtener un espectro de NMR consiste en inducir una transición entre esos subniveles. El papel del imán es crear los subniveles energéticos, el papel del emisor de radiofrecuencia es el de suministrar al núcleo la energía necesaria para provocar una transición entre los subniveles (es decir, invertir el espín nuclear ya que corresponde a pasar de una orientación + a una -). El estudio de esas transiciones constituye la **espectroscopia de resonancia magnética** [11].

Del mismo modo que en UV y en IR, solo son absorbidas las radiaciones cuya frecuencia satisface la relación de Bohr:

$$\Delta E = h\nu, \quad (3)$$

donde $\Delta E = \frac{\mu B_0}{J}$ entre dos subniveles vecinos

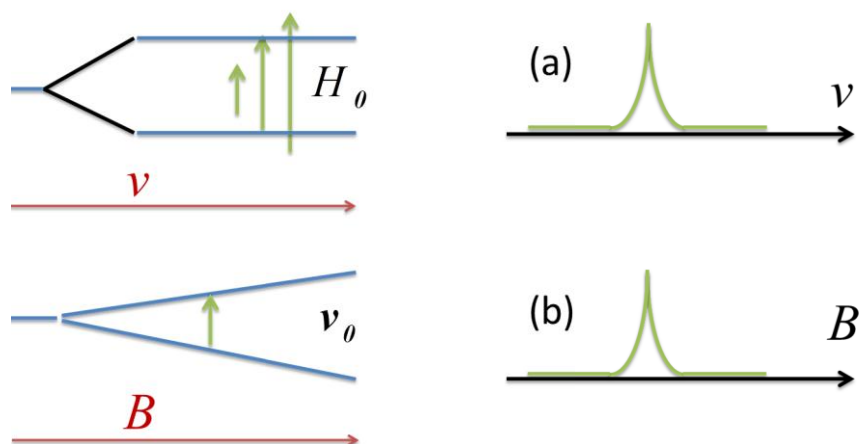
$$h\nu = \frac{\mu B_0}{J}, \gamma = \frac{2\pi\mu}{Jh} \quad (4)$$

$$\nu = \frac{\mu B_0}{hJ} \Rightarrow \nu = \frac{\gamma B_0}{2\pi}$$

Para un campo dado B_0 solo la frecuencia $\frac{\gamma B_0}{2\pi}$ será absorbida y provocará una transición entre dos subniveles vecinos.

En la Figura 4 se ilustran las dos formas de obtener el espectro de resonancia magnética, en la actualidad dentro de MNR se utilizan las dos técnicas de forma consecutivas para observar la estructura y relación de los diferentes compuestos dentro de una misma muestra [11].

Figura 4. Maneras de obtener el espectro de resonancia magnética. (a) Barrido de frecuencia de los fotones. (b) Barrido de campo magnético.

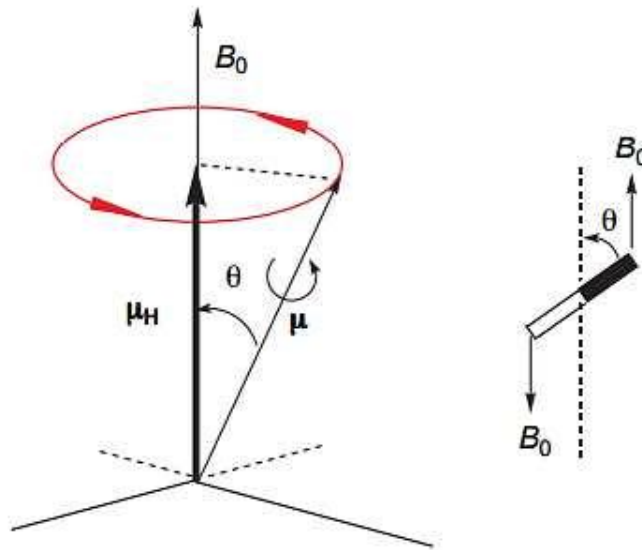


[Fuente] M. Preite, "Espectroscopía de resonancia magnética nuclear," *Química Orgánica*, vol. 5ª edición, no. 13, pp. 539–599, 2004.

1.2.3 Precesión y frecuencia de Larmor.

Si bien la condición de Bohr es necesaria, no es suficiente. Hace falta que la componente magnética B_1 de la radiación electromagnética producida por el emisor, gire con una velocidad angular apropiada en un plano perpendicular a la dirección del campo estático B_0 , como se ilustra en la Figura 5.

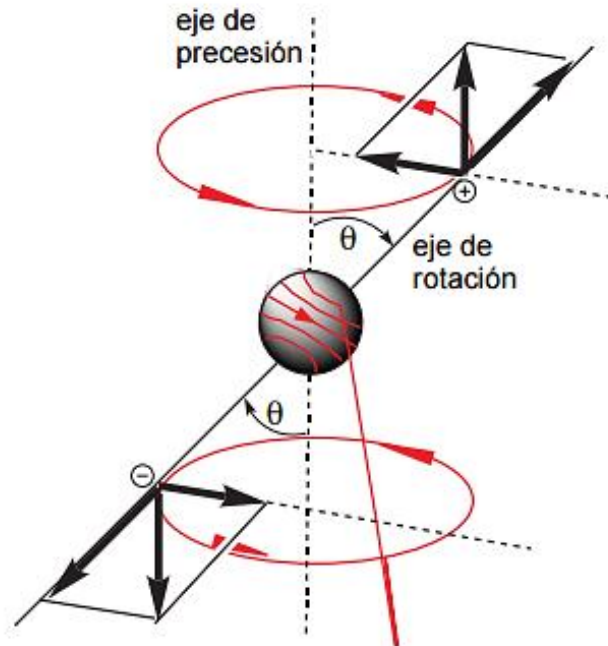
Figura 5. Núcleo de espín cuyo momento magnético μ forma un ángulo θ con el campo estático B_0 (el ángulo no puede tomar un valor cualquiera pues está cuantizado: $\cos \theta = \frac{m}{J}$).



[Fuente] E.- Madrid, D. De Química, F. De Ciencias, and S. Rey, "RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR DE PROTÓN :," pp. 1-47.

El campo B_0 actúa sobre el núcleo como un par de fuerzas que trata de disminuir el ángulo θ , sin embargo como el núcleo tiene un movimiento de rotación, el resultado global es el de hacer describir al núcleo un movimiento de precesión, como se ilustra en la Figura 6.

Figura 6. Movimiento de precesión descrito por el núcleo.



[Fuente] E.- Madrid, D. De Química, F. De Ciencias, and S. Rey, "RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR DE PROTÓN :," pp. 1–47.

El movimiento de precesión se describe alrededor del eje precesión, que coincide con la dirección del campo B_0 . En la figura 6, el sentido de la precesión depende de θ , para $\theta > 90^\circ$ el giro será en sentido contrario. La velocidad angular del movimiento de precesión viene dada por la ecuación de Larmor:

$$\omega_0 = \gamma B_0 \quad (5)$$

En donde se muestra que la velocidad no depende el ángulo θ sino solamente del campo magnético aplicado y de la razón giro magnética [11].

1.2.4 Proceso de relajación.

Al finalizar el pulso de radiofrecuencia (RF) se necesita un tiempo para que la magnetización vuelva a alcanzar el equilibrio. Debido a que en RMN la emisión

espontanea es muy poco efectiva, el retorno al equilibrio se logra a través de los procesos de relajación.

Un proceso de relajación en la transición sin radiación que hace un núcleo de espín de su estado excitado a su estado inferior o fundamental [12].

Los procesos de relajación se dividen en dos categorías:

- **Relajación espín-red o longitudinal.** En la misma dirección que el campo aplicado.
- **Relajación espín-espín o transversal.** Perpendicular a la dirección del campo.

Relajación de la imanación longitudinal o proceso T1. Es un conjunto de procesos mediante los que se recupera la magnetización longitudinal perdida tras el pulso de radiofrecuencia y se alcanza la magnetización del equilibrio termodinámico.

La interacción entre los espines nucleares en estado de excitación y los campos magnéticos fluctuantes generados por el entorno molecular o retículo devuelven el espín excitado al estado fundamental desprendiendo calor.

La relajación longitudinal depende de la movilidad del retículo que es relativamente eficiente en los líquidos, pero no lo es en los líquidos viscosos y en los sólidos cristalinos donde las movilidades son bajas [12].

Relajación de la imanación transversal o proceso T2. Conjunto de procesos mediante los que la magnetización transversal decae hasta prácticamente cero tras un pulso de radiofrecuencia.

En esta relajación también llamada espín-espín los espines nucleares dejan de hacer precesión perdiendo la magnetización transversal (Plano XY) [12].

Este desfase se produce por tres fenómenos:

- La interacción dipolar entre un espín en su estado excitado y otro espín del mismo tipo en su estado fundamental, el espín excitado retorna al estado fundamental transfiriendo energía al otro espín que sufre la transición al estado excitado.
- Desplazamiento químico. Los núcleos con diferente desplazamiento hacen precesión a diferentes frecuencias.
- In-homogeneidades en el campo magnético externo. Núcleos bajo diferentes valores del campo magnético externo hacen precesión a diferentes frecuencias.

1.3 ESPECTROSCOPIA DE RMN.

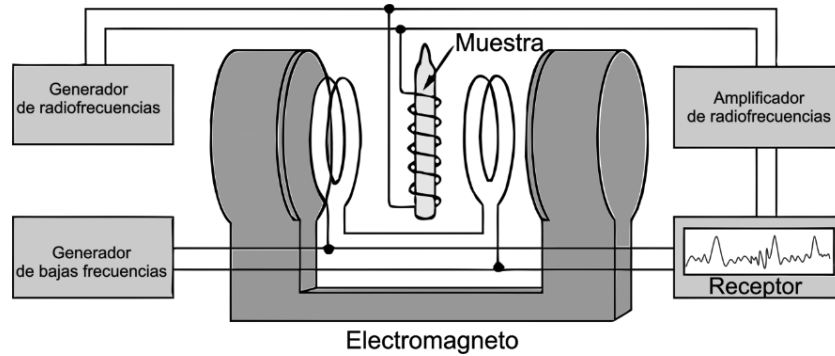
Las técnicas espectroscópicas se basan en la posibilidad de que la molécula bajo estudio pueda estar en más de un nivel de energía, de tal forma que al inducir radiación electromagnética en la frecuencia adecuada, se pueda pasar de un nivel energético a otro. Como se ha visto en el apartado anterior, este tipo de transiciones da lugar a la espectroscopia de resonancia magnética nuclear.

1.3.1 Descripción de los equipos de RMN.

En el proceso de muestreo de señales de NMR se inducen campos magnéticos a un objeto para alinear temporalmente los momentos magnéticos de los núcleos de átomos de determinados elementos. La intensidad de los campos, el momento magnético y el espín nuclear determinan la frecuencia de resonancia y el estado de los núcleos, estos a su vez se orientarán de manera paralela o anti-paralela al campo, para el caso de núcleos con espín $\frac{1}{2}$ [13]. Para estimar la emisión de energía que será detectada, se usa radiación electromagnética a una determinada frecuencia de resonancia, esto hace que los átomos que se encuentran en estado paralelo (o de baja energía) pasen al estado anti-paralelo (o de alta energía), es decir, cambian de espín, y después de un tiempo retornarán a su estado inicial, liberando la energía absorbida, esta energía puede ser detectada y archivada. El rango de las frecuencias usadas corresponde a las ondas de radio, que son emitidas por una bobina que hace las veces de transmisor y receptor del sistema [2]. En el proceso de adquisición se inducen campos magnéticos con diferente intensidad y frecuencia sobre el objeto, de este modo, varía la frecuencia de resonancia de forma controlada.

Generalmente en espectroscopia se varía la frecuencia de la radiación incidente, hasta que se observa absorción. Sin embargo, en espectroscopia de NMR se tiene además la opción de mantener fija la frecuencia de la radiación y variar el espacio entre los niveles, variando también la magnitud del campo magnético aplicado hasta que se observe absorción.

Figura 7. Esquema de un sistema de muestreo de señales de resonancia magnética.



La señal observada en el detector contendrá todas las posibles resonancias y se analiza con un ordenador utilizando técnicas de transformada de Fourier. Este procedimiento permite obtener muy alta resolución y trabajar con núcleos de señales débiles, que con otros procedimientos estos núcleos no podrían detectarse, como se ilustra en la Figura 7.

La información adquirida corresponde a una respuesta de resonancia magnética nuclear, que se representa en un decaimiento inducido libre (FID, de su sigla en inglés) [3]. Por medio de la transformada de Fourier es posible extraer el espectro de FID. Un espectro de un FID tiene baja relación señal a ruido, pero puede aumentarse con un promedio de adquisiciones repetidas, aunque en ocasiones el número de repeticiones puede ser excesivo, dependiendo de la sensibilidad de los elementos de interés.

Una señal de NMR muestreada en el dominio del tiempo y representada en un vector f está asociada con un espectro en el dominio de la frecuencia de la siguiente manera:

$$\mathbf{TF} = f, \quad (6)$$

donde \mathbf{T} representa la transformada inversa de Fourier discreta. La Ecuación (1) puede ser definida para una o múltiples dimensiones. Si la señal se muestrea regularmente, es decir, bajo el criterio de Nyquist [14], [15], el número de puntos

desconocidos en el espectro de F es igual al número de elementos en la señal en el dominio del tiempo f , y la Ecuación (1) tiene una solución única.

1.4 RMN MULTIDIMENSIONAL

Existe la posibilidad de excitar la muestra con uno o más pulsos de radiofrecuencia, cada uno de ellos aplicado con una potencia, duración, frecuencia, forma y fase particulares, e introducirlos en un momento específico durante el experimento de NMR, generalmente antes de que el sistema haya regresado al equilibrio por relajación. Esto permite diseñar toda gama de secuencias de pulsos de las que se puede extraer información molecular muy variada.

Una secuencia de pulsos puede estar determinada por: 1) el número de pulsos de RF que afectan a uno o más tipos de núcleos. 2) los tiempos de espera para que el sistema evolucione de una determinada forma, estos tiempos de espera son fijos o incrementales a medida que se repite el experimento. 3) los gradientes de campo magnético; y 4) la etapa final en la que se adquiere el FID [16].

En un experimento de NMR multidimensional la secuencia de pulsos debe constar de al menos dos pulsos y estos deben estar separados por un periodo de espera incrementable. La secuencia de los pulsos se repite un número de veces arbitrario, adquiriéndose un FID en cada repetición. La fase de algunos pulsos puede alterarse en cada repetición y la duración de uno o más tiempos de espera puede incrementarse. Si la secuencia de pulsos tiene un tiempo de espera incrementable, el experimento tendrá dos dimensiones; si tiene dos, será de tres dimensiones; si tiene tres, el experimento será de cuatro dimensiones. Aunque en la teoría no existe un límite en el número de dimensiones de un experimento, físicamente existen limitaciones impuestas por la consiguiente pérdida de señal, que es causada por la relajación que implica la detección de las distintas dimensiones.

Los métodos de RMN bidimensional se han convertido en las técnicas más importantes para la resolución de estructuras, estudios de dinámica y reacciones de los biopolímeros de disolución. Los picos unidimensionales dan información de un sitio químico en particular: cómo es su ambiente químico, cuántos núcleos hay presentes, cuántos núcleos están cerca del sitio, etc. Pero no pueden informar

cómo esos sitios se conectan entre sí, lo cual es muy útil si se quiere dilucidar la estructura de una molécula. En un experimento de NMR se recoge una matriz de datos en la que las filas son cada uno de los espectros individuales a cada incremento de tiempo de evolución (t_1) y las columnas son el comportamiento en cada uno de esos incrementos de una frecuencia determinada. Todo experimento de RMN 2D tiene el mismo formato general:

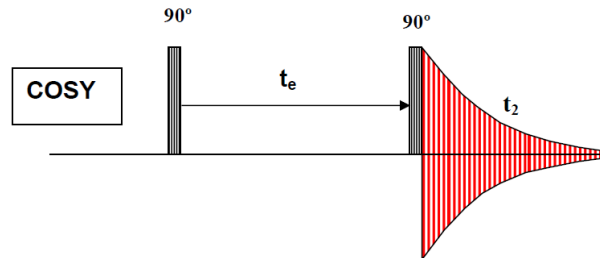
Preparación \Rightarrow Evolución \Rightarrow Mezclado \Rightarrow Detección
 t_1 t_2

- **Preparación:** El periodo de preparación (t_p), es un tiempo de retardo cuyo propósito es asegurar que la magnetización de equilibrio se ha establecido antes de empezar o repetir una secuencia de pulsos en el proceso que se realiza para mejorar la relación señal/ruido. Generalmente se utilizan un pulso de 90° (los dos estados de energía del espín están ocupados por igual) que genera una magnetización transversal.
- **Evolución:** El periodo de evolución (t_1), corresponde a la segunda dimensión de los espectros bidimensionales, las resonancias se procesan en el marco de rotación de acuerdo a sus desplazamientos. Esto significa que la magnetización es una frecuencia que depende del valor (t_1).
- **Mezclado:** El periodo de mezcla (t_m), incluye uno o varios pulsos de radiofrecuencia y tiempos de retardo con el propósito de transferir coherencia entre espines. La magnetización se transfiere a través de los enlaces (o a través del espacio o por intercambio químico).
- **Detección:** En el periodo de detección (t_2), el sistema evoluciona y se registra la FID.

En un experimento completo los tiempos de preparación, mezcla y detección son fijos en cada medida, mientras que el tiempo de evolución se incrementa a intervalos regulares entre medidas [17].

En la Figura 8 se ilustra la secuencia básica COSY, es una de las técnicas más simples y útiles en los experimentos de MNR, y es un método para encontrar relaciones homonucleares a través de un enlace [11].

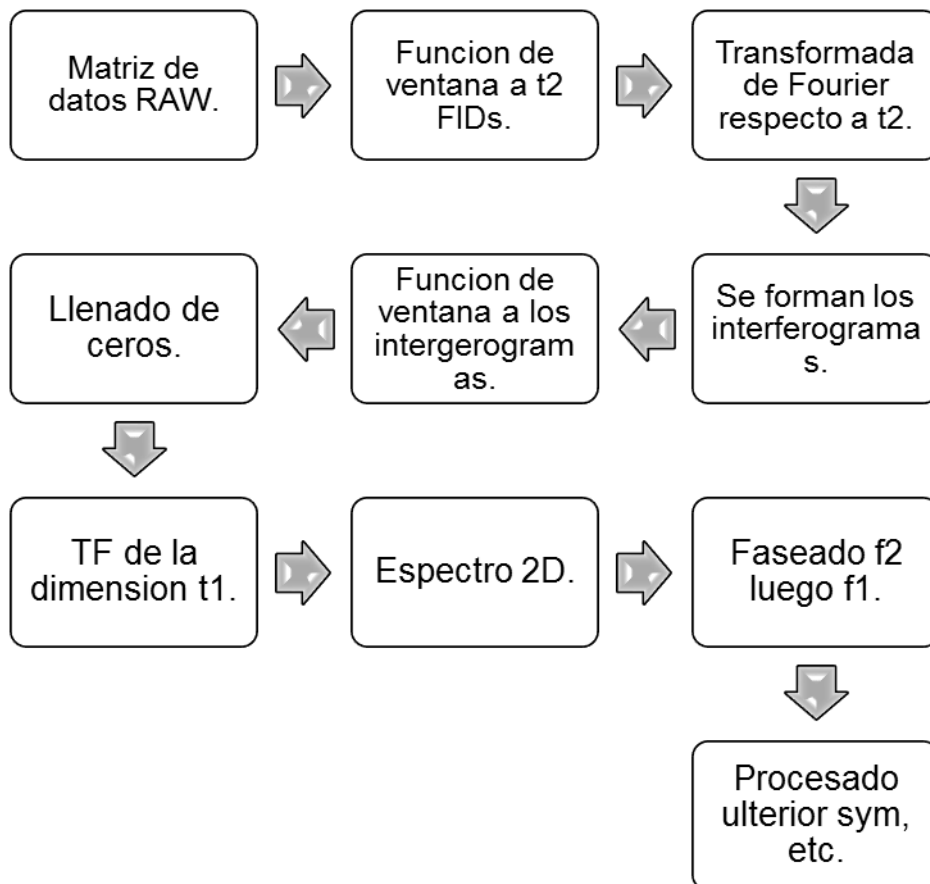
Figura 8. Ejemplo simplificado del formato general con una **secuencia básica COSY-90.**



[Fuente] "Jean Jeener," no. 1976.

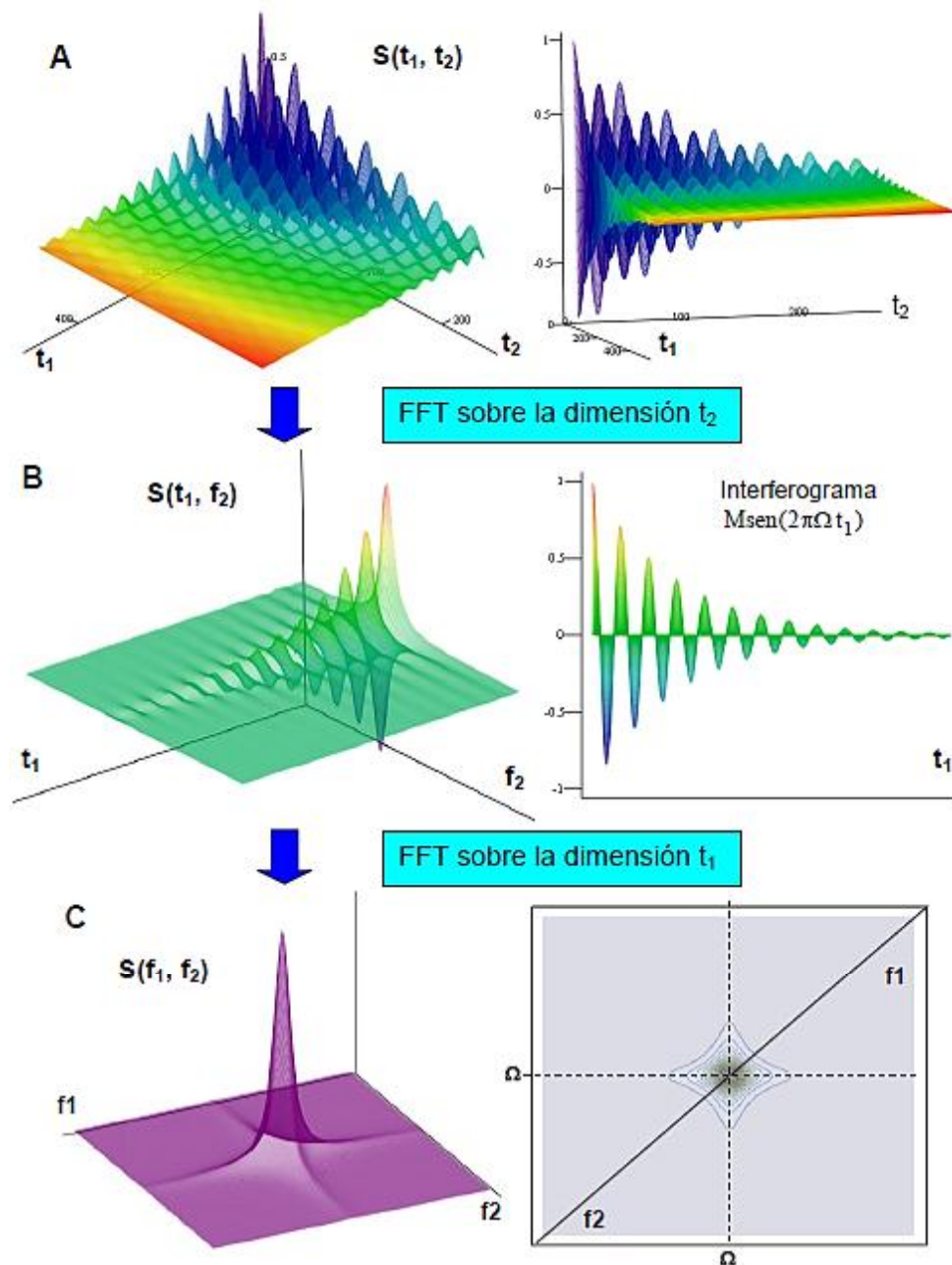
Todas estas etapas están separadas convenientemente por pulsos de RF. Un experimento de NMR está compuesto por una serie de pasos para obtener un espectro, como se muestra en el Diagrama 1 [18].

Diagrama 1. Proceso para la obtención de un espectro bidimensional.



En la Figura 9 se ilustra de forma gráfica y detallada el proceso de la Figura 8 para la obtención de un espectro bidimensional [11].

Figura 9. Ejemplo gráfico del proceso para la obtención del espectro de NMR 2D.



[Fuente] "Jean Jeener," no. 1976.

1.4.1 Esquemas experimentales para las técnicas de RMN-2D.

El término NMR-2D abarca un amplio conjunto de técnicas que tienen en común el uso de secuencias específicas de pulsos de radiofrecuencia para manipular la evolución de la magnetización de una muestra, modificando el Hamiltoniano (función que describe el estado de un sistema mecánico en términos de las variables posición y momento) [19] del sistema en cada periodo delimitado por los pulsos de la secuencia. Para NMR-2D los dos tipos de experimentos más usados son:

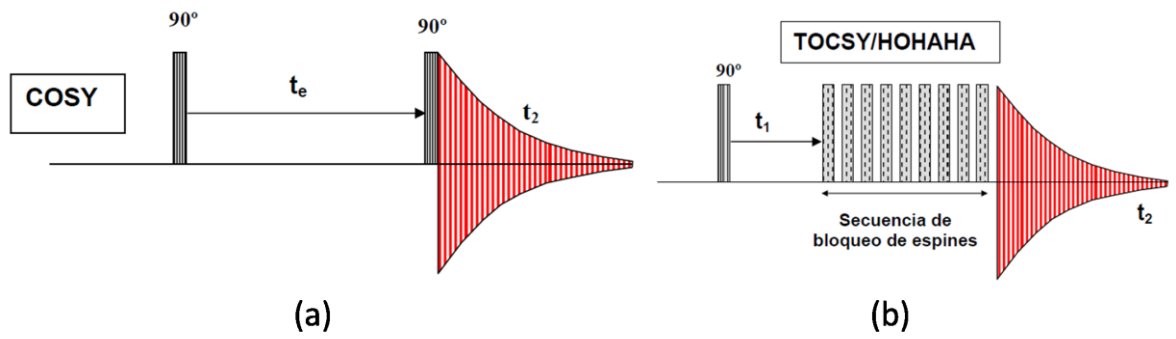
- Experimentos bidimensionales de correlación escalar. COSY (“**C**ORrelated **S**pectroscop**Y**”) y TOCSY (“**T**OTAL **C**ORRELATION **S**pectroscop**Y**”).
- Experimentos bidimensionales de correlación dipolar. NOESY (“**N**uclear **O**verhauser **E**ffect **S**pectroscop**Y**”) y ROESY (“**R**otating frame **O**verhauser **E**ffect **S**pectroscop**Y**”).

Los principales, así como los más usados, experimentos 2D homonucleares (^1H - ^1H) son:

- COSY: Se obtienen correlaciones cruzadas (picos fuera de la diagonal) entre señales correspondientes a protones acoplados escalarmente.
- TOCSY: Se obtiene mediante una combinación adecuada de pulsos de RF, se consigue crear una situación de fuerte acoplamiento entre los protones acoplados entre sí, lo que da lugar a la observación de señales entre sistemas completos de espines, de gran utilidad en la asignación de segmentos moleculares que se extienden a lo largo de tres o más átomos de carbono.
- NOESY: Se observan correlaciones cruzadas entre protones cercanos en el espacio cuya intensidad proporciona información acerca de la distancia que los separa.

En la Figura 10 se ilustra la secuencia de pulsos para los experimentos COSY y TOCSY.

Figura 10. Secuencia de pulsos para los experimentos (a) COSY y (b) TOCSY.



[Fuente] "Jean Jeener," no. 1976.

2. MUESTREO COMPRESIVO

El muestreo compresivo (CS) es una nueva teoría para adquirir y reconstruir una señal de manera eficiente mediante la búsqueda de la solución de baja densidad a un sistema indeterminado de ecuaciones lineales [5]. CS establece que es posible reconstruir cierto tipo de señales a partir de una cantidad de muestras menor que la requerida por los métodos convencionales, basados en el teorema de muestreo de Nyquist [14], [15]. La teoría de CS se basa principalmente en dos condiciones: (1) la baja densidad de las señales y (2) la incoherencia de la matriz de medición, que depende de la trayectoria de muestreo [20].

El teorema de Nyquist establece que es necesario muestrear a una frecuencia superior a dos veces el ancho de banda de la señal para evitar la pérdida de información. En algunos casos, el número de muestras necesarias para cumplir con este requerimiento es tan grande que es necesario recurrir a algoritmos de compresión para facilitar el almacenamiento y la transmisión de señales. En contraste, el enfoque de CS integra las tareas de muestreo y compresión en un solo proceso, reduciendo los esfuerzos y costos relacionados con el incremento de la tasa de muestreo necesaria con métodos tradicionales.

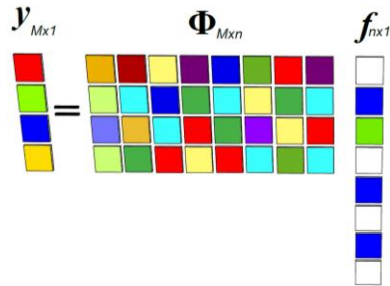
2.1 BAJA DENSIDAD.

Se dice que una señal es de baja densidad o dispersa si la mayoría de sus elementos están cerca o son iguales a cero. Teniendo la señal discreta $\mathbf{f} \in \mathbb{R}^n$, con $n = N^2$, se asume un proceso de medición lineal que calcula $M \ll n$ productos internos entre \mathbf{f} y una colección de vectores $\{\phi_j\}_{j=1}^M$ como $y_i = \langle \mathbf{f}, \phi_j \rangle$, entonces, el vector de mediciones se puede representar como

$$\mathbf{y} = \Phi \mathbf{f}, \quad (7)$$

donde el conjunto de proyecciones y_i forman el vector $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^m$, $\Phi \in \mathbb{R}^{M \times n}$ con filas ϕ_j . Teniendo en cuenta la reconstrucción de \mathbf{f} a partir de \mathbf{y} , se sabe que existen infinitas soluciones para la ecuación (7), porque la dimensionalidad de \mathbf{y} es mucho menor que la de \mathbf{f} . En otras palabras, hay menos ecuaciones que incógnitas. Este sistema está representado en la Figura 11.

Figura 11. Submuestreo lineal $y = \Phi f$.



CS explota el principio de que la mayoría de las señales naturales pueden expresarse en una base adecuada con un número pequeño de coeficientes. La dispersión es un requisito clave para la aplicación de la teoría de CS. Sin embargo, muchas de las señales de la naturaleza no son dispersas, pero se pueden volver dispersas adoptando una transformación. Matemáticamente, $f \in \mathbb{R}^n$ puede ser expresada como:

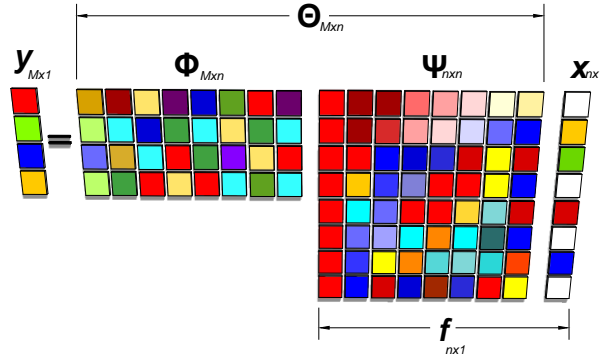
$$f = \Psi x, \quad (8)$$

donde x es la secuencia de coeficientes que representan a f en la base ortonormal Ψ , que es una matriz con columnas $[\psi_1, \dots, \psi_n]$. Claramente, f y x son representaciones equivalentes de la misma señal. Sin embargo, si se cumple la condición de dispersión, con apenas M coeficientes de x , con $M \ll n$, es posible reconstruir f a partir de la transformación (8) [5]. De acuerdo con las ecuaciones (7) y (8):

$$y = \Phi f = \Phi \Psi x = \Theta x \quad (9)$$

La Figura 12 muestra la representación gráfica de la ecuación (9), donde $\Theta = \Phi \Psi$ de $M \times n$ es la matriz de muestreo compresivo.

Figura 12. Muestreo compresivo, \mathbf{y} es el vector de proyecciones, Φ es la matriz de medición, \mathbf{f} es la señal original, Ψ es alguna base de representación dispersa y \mathbf{x} es el vector de coeficientes dispersos.



2.2 MUESTREO INCOHERENTE.

El sistema de ecuaciones indeterminado (9) hace que la recuperación de \mathbf{x} sea imposible sin tener más información. Afortunadamente, en CS es posible, si se satisface que la matriz de medición Φ sea incoherente con la transformación dispersa Ψ . La incoherencia significa que la señal a ser reconstruida, con una representación dispersa en alguna base Ψ , no puede ser dispersa en el dominio en el que se haya adquirido. La coherencia entre la matriz de medición y la base de representación se expresa como:

$$\mu(\Phi, \Psi) = \sqrt{n} \cdot \max_{1 \leq k, j \leq n} |\langle \phi_k, \psi_j \rangle| \quad (10)$$

La coherencia mide la mayor correlación entre los elementos de Φ y de Ψ . Si Φ y Ψ contienen elementos correlacionados, la coherencia es alta, de lo contrario es baja. Un ejemplo de bases incoherentes son las bases de representación Wavelets con las bases Noiselets [5]. Por otro lado, las matrices aleatorias son en gran medida incoherentes con cualquier base fija Ψ . Teniendo en cuenta una base ortonormal uniforme aleatoria, con alta probabilidad, la coherencia entre Φ y Ψ es cerca de $\sqrt{2 \log n}$.

La condición de incoherencia puede preservar la información, ya que requiere que la energía de la señal se distribuya por todo el dominio de detección. Cada medición recoge información de todos los componentes de la imagen. Lo ideal es

que una matriz de medición asegure que la información relevante en cualquier señal compresible no este dañada por la reducción de dimensionalidad de f a y [5], [21].

2.3 RECONSTRUCCIÓN.

Dado un conjunto de medidas y , la reconstrucción se enfoca en resolver un sistema lineal de ecuaciones indeterminado a partir de la estimación de f con una función de minimización. Esto se plantea como:

$$f = \Psi \left(\arg \min_x \|y - \Theta x\|_2^2 + \tau \|x\|_1 \right), \quad (11)$$

donde Ψ es una base de representación dispersa, Θ es la matriz de muestreo compresivo, x es el vector de coeficientes dispersos, el parámetro τ es una constante de regularización y $\|\cdot\|_1$ y $\|\cdot\|_2$ corresponden a las normas l_1 y l_2 , respectivamente.

Para la reconstrucción es necesario recurrir a algoritmos que se puedan ajustar para converger de manera rápida en problemas de este tipo, como el algoritmo GPSR y SPARSA, que pueden resolver el problema planteado en la ecuación (7) [22] y el algoritmo TwIST, que usa un diccionario disperso implícito como variación total (del inglés *total variation*) para resolver el problema de optimización [23].

3. MUESTREO COMPRESIVO EN RESONANCIA MAGNÉTICA

El tiempo de adquisición de datos es un factor determinante para muchas de las aplicaciones de MR, sin embargo, la velocidad de este proceso está limitada por algunos factores [7]. La incorporación del muestreo compresivo en la adquisición de señales de resonancia magnética ha permitido reducir la cantidad de datos que se obtienen de un objeto determinado, sin comprometer la calidad de los resultados, lo que a su vez contribuye con la aceleración del proceso de adquisición [6] [8].

Se han estudiado algunas aplicaciones de CS en imágenes por MR como angiografía 3D rápida con mejora de contraste, imágenes coronarias de corazón entero, imágenes cerebrales e imágenes dinámicas de corazón, con el fin de determinar cuáles son los factores que interfieren en la realización de un muestreo compresivo exitoso según sus requerimientos en cuanto a los dominios de dispersión y las trayectorias de muestreo [24]. De esta manera, el estudio del CS-MRI ha sido de gran interés para numerosos trabajos recientemente. Con base en los beneficios proporcionados por el CS, se han realizado diversos esfuerzos por mejorar este método por medio del desarrollo de algoritmos utilizando transformada wavelet [25] [26], estos métodos reconstruyen las MRI con la dispersión estándar. Adicionalmente, algunos trabajos han buscado mejorar la precisión de la reconstrucción aprovechando la estructura de árbol wavelet [27], [28]. También se ha propuesto una forma efectiva de mejorar la calidad visual de las imágenes por medio de un algoritmo de optimización ponderada para la reconstrucción después del submuestreo aleatorio [29].

Por otro lado, algunos trabajos se han enfocado en el desarrollo de variantes de CS para espectroscopia multidimensional [30], [16] y CS como una técnica de reconstrucción alternativa para espectroscopia NMR [31]. En general, se ha estudiado la forma de reconstruir espectros en múltiples dimensiones de NMR a partir del submuestreo y el muestreo no uniforme con el fin de disminuir los tiempos de adquisición [23].

El tiempo de un experimento de 1D es usualmente de entre varios segundos y días completos, sin embargo, para un experimento 2D el tiempo depende de las dos variables de tiempo t_1 y t_2 .

Por lo general, t_1 es un conjunto de $t_1 = \Delta t_1, 2\Delta t_1, 3\Delta t_1, \dots, n_1 \Delta t_1, N_1 \Delta t_1$ (el incremento Δt_1 esta por el orden de milisegundos).

El número de incrementos para t_1 está determinado:

$$N_1 = \frac{SW_1}{\Delta f_1}, \quad (12)$$

donde $SW_1 = \frac{1}{\Delta t_1}$ es la anchura espectral deseada y $\Delta f_1 = \frac{1}{N_1 \Delta t_1}$ es la resolución espectral. Normalmente N_1 esta entre 50 y 500. Dado un valor fijo $t_1 = n_1 \Delta t_1$, se realiza un escaneo y la señal FID es detectada y almacenada a lo largo de la dimensión directa. Después del escaneo, hay un tiempo para que los espines nucleares retornen a su estado de equilibrio para el siguiente escaneo con $t_1 = (n_1 + 1) \Delta t_1$. Finalmente, se aplica la Transformada de Fourier a los datos recogidos. Si el tiempo para obtener todos los pulsos en un escaneo es t_p , el tiempo total de escaneo para un espectro de resonancia magnética nuclear de 2D está dado por:

$$T_{N_1} = \sum_{n_1=1}^{N_1} (d_1 + n_1 \Delta t_1 + t_m + t_2 + t_p) = N_1 \left(d_1 + \frac{(1 + N_1) \Delta t_1}{2} + t_m + t_2 + t_p \right) \quad (13)$$

Con el fin de obtener alta resolución en la dimensión indirecta, N_1 es generalmente varias decenas o cientos. Esto hace que el tiempo de exploración para un experimento de RMN2D sea de varios minutos e incluso horas [16].

En este proyecto, el objetivo es reducir el número de escaneos en la dimensión t_1 . Sustituyendo el incremento uniforme en la dimensión indirecta, con Q arbitrario de n_q , y $t_1 = n_q \Delta t_1$.

De esta manera, se tiene que:

$$p = \frac{Q}{N_1} \quad (14)$$

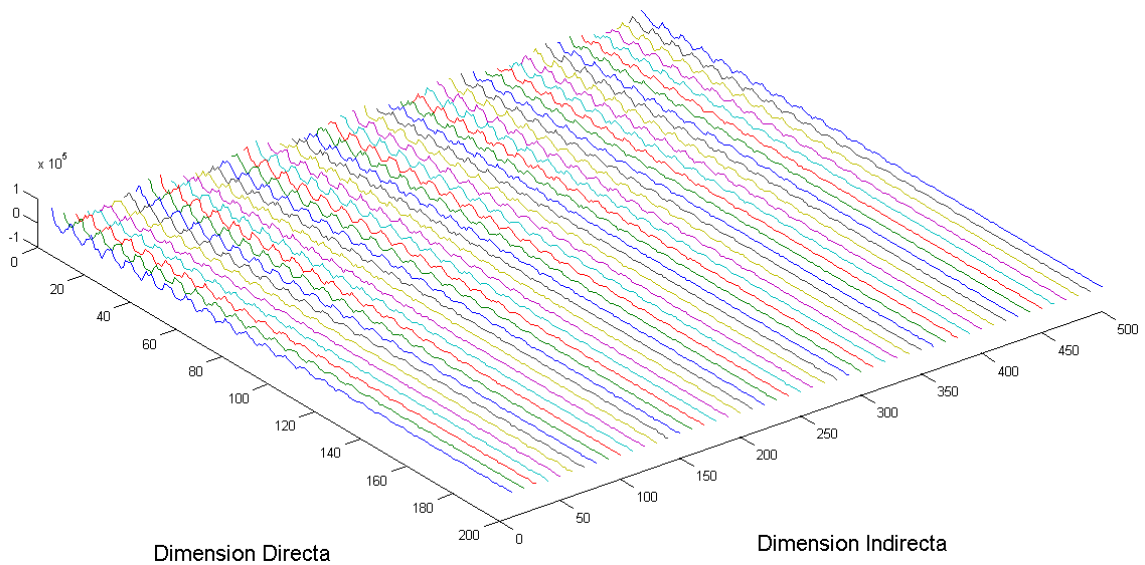
es la velocidad de muestreo y el tiempo total de escaneo en un espectro de NMR2D es aproximadamente:

$$T_q = \frac{Q}{N_1} T_{N_1} = p T_{N_1} \quad (15)$$

Si la velocidad de muestreo (p) es lo suficientemente pequeña puede reducir en gran medida la adquisición de datos de la dimensión indirecta.

En la Figura 13 se puede ver un espectro en el dominio del tiempo en el que se le aplica submuestreo a la dimensión indirecta con una velocidad de muestreo p . Esto significa que se reduce el tiempo de adquisición comparado con un esquema convencional cerca de la mitad.

Figura 13. Ejemplo de submuestreo aleatorio en la dimensión indirecta.



3.1 DISPERSIÓN EN SEÑALES DE RESONANCIA MAGNÉTICA.

Para una señal $x \in \mathbb{R}^N$ y una base de representación dispersa $\Psi \in \mathbb{R}^{S \times N}$ (ej., Fourier, transformada discreta coseno o transformada wavelet), la dispersión se interpreta como:

$$S = \|\alpha\|_0 = \|\Psi x\|_0 = N, \quad (16)$$

donde $\| \cdot \|_0$ denota la norma ℓ_0 que cuenta las entradas diferentes a cero en α , y S es el número de entradas diferentes de cero. Si x es dispersa naturalmente es llamada auto-dispersa, por lo tanto una transformación no sería necesaria.

3.2 DISEÑO DE LAS MATRICES DE SUBMUESTREO.

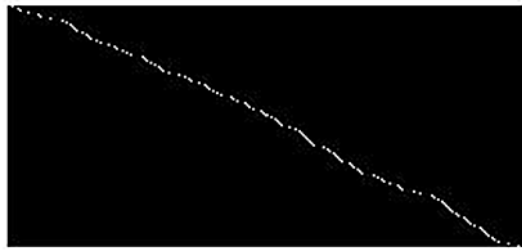
Como se analizó en la sección anterior no es necesaria la transformación a una base de representación dispersa para la aplicación de CS en el espectro NMR. Es necesario analizar de qué manera se puede optimizar el submuestreo. Para esto, se propone simular el proceso de muestreo usando matrices de submuestreo, que actúan sobre espectros medidos a las tasas tradicionales. En esta sección se presentan algunas matrices que serán evaluadas en su desempeño en cuanto a la reconstrucción de los espectros.

Las matrices de submuestreo se diseñaron siguiendo unos patrones específicos para observar como varían las reconstrucciones en cada una de ellas, originalmente siempre se usa el submuestreo arbitrario pero en este proyecto se utilizó todas las posibles variaciones de selección utilizando el mismo número de puntos que halla el submuestreo arbitrario.

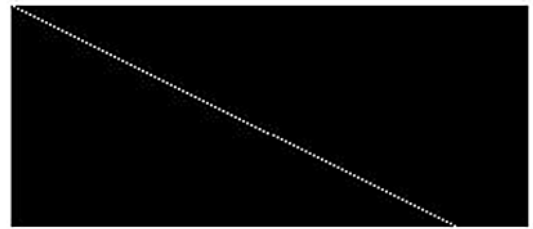
La matriz de submuestreo original permite seleccionar de manera arbitraria los FIDs que se usan para la reconstrucción, la cantidad de FIDs se establece como un parámetro de diseño y como una variable asociada a cada matriz de submuestreo.

En la Figura 14 se muestran algunas de las máscaras. Cada posición (i,j) de la matriz de la máscara con el valor de 1 corresponde a la fila del espectro original que será seleccionado. **(a)** Matriz de submuestreo generada aleatoriamente. **(b)** Matriz de submuestreo x -espaciada donde x varía dependiendo de los espectros que serían seleccionados. **(c)** Matriz de submuestreo que toma los primeros FIDs del espectro. **(d)** Matriz de submuestreo que toma los FIDs de la zona media del espectro. **(e)** Matriz de submuestreo que toma los últimos FIDs del espectro. **(f)** Matriz de submuestreo que repite 1/3 de los FID obtenidos de manera aleatoria. Los FIDs que repite se generan de forma aleatoria dependiendo de los FID obtenidos aleatoriamente.

Figura 14. Matrices de submuestreo utilizadas para la reconstrucción del espectro.



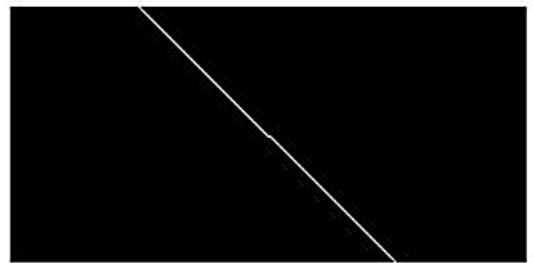
(a)



(b)



(c)



(d)



(e)



(f)

3.3 RECONSTRUCCIÓN DEL ESPECTRO.

En este trabajo se propone reconstruir el espectro de NMR2D auto-disperso mediante la solución del problema inverso

$$x = \left(\arg \min_x \|y - \Theta x\|_2^2 + \tau \|x\|_1 \right), \quad (17)$$

donde y son las mediciones en el dominio de tiempo, Θ es la matriz de submuestreo definida para obtener los FIDs de la dimensión indirecta. La solución a este problema se plantea con base en el algoritmo SPARSA [33].

En el Algoritmo 1 se muestra el seguimiento que se hace desde la obtención del espectro hasta su reconstrucción.

Algoritmo 1. Diagrama de flujo del algoritmo utilizado para la simulación.

Inicialización:

$S \leftarrow$ espectro

$T \leftarrow$ tasa de submuestreo

$\tau \leftarrow$ tolerancia

$e \leftarrow$ error

Main:

% Aplicar la transformada inversa de Fourier al espectro

$x \leftarrow F(S)$

$\Theta \leftarrow$ *% crear matriz de submuestreo(T)*

$y \leftarrow \Theta * x$

$$\hat{x} \leftarrow \min_{x \in \mathbb{R}^n} \frac{1}{2} \|y - \Theta x\|_2^2 + \tau \|x\|_1$$

$$e = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\hat{x} - x)^2$$

Retornar: \hat{x}, e

4. SIMULACIONES Y RESULTADOS

En esta sección se aborda la simulación para diferentes tipos de tasas de submuestreo y usando cada una de las 6 matrices de submuestreo indicadas en la sección anterior. El error cuadrático medio entre la reconstrucción y el espectro original se calcula como:

$$\mathbf{Error} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\hat{x} - \tilde{x})^2, \quad (18)$$

donde \tilde{x} es el espectro original y \hat{x} es el espectro reconstruido. Entre más pequeño es el error cuadrático medio, más consistente es el espectro reconstruido con respecto al original haciendo que la medida de dispersión de los datos y la reconstrucción sea más confiable.

Los resultados del método propuesto se verifican a través de los espectros: $^1\text{H}-^{13}\text{C}$ HMBC, $^1\text{H}-^{13}\text{C}$ HSQC, $^1\text{H}-^{13}\text{C}$ HMBC, $^1\text{H}-^1\text{H}$ JRES, $^1\text{H}-^1\text{H}$ COSY y $^1\text{H}-^1\text{H}$ TOCSY.

El primer paso en la simulación es obtener la matriz de submuestreo que permite mejor reconstrucción y demostrar que no es necesaria una base de representación dispersa para obtener mejores resultados ya que las señales de NMR son auto-dispersas. Estos datos se muestran en la Tabla 3, Tabla 4, Tabla 5, y donde la tasa de submuestreo se indica con la variable T . En esta simulación se utilizan las bases de representación dispersa DCT y Wavelet ya que son las más usadas para muestreo compresivo [34][35] y se compara con la matriz identidad.

Tabla 3. Errores de reconstrucción para la matriz identidad como base de representación dispersa.

		Matrices de Submuestreo						
		a	b	c	d	e	f	
$T = 0.35$	Experimentos	HMBC	2,87E-03	3,29E-03	2,14E-03	4,43E-03	2,34E-03	2,89E-03
		HSQC	7,63E-04	7,28E-04	7,43E-04	7,49E-04	6,99E-04	7,53E-04
		HMBC	1,30E-05	1,43E-05	9,30E-06	1,89E-05	1,01E-05	1,25E-05
		JRES	1,22E-02	1,41E-02	9,02E-03	1,86E-02	1,10E-02	8,70E-03
		COSY	1,59E-02	2,03E-02	1,28E-02	2,69E-02	1,52E-02	1,94E-02

		03	03	03	03	03	03
	TOCSY	1,15E-02	1,11E-02	9,62E-03	1,38E-02	1,05E-02	1,11E-02
	Promedio	4,81E-03	5,20E-03	3,80E-03	6,73E-03	4,35E-03	4,23E-03

Tabla 4. Errores de reconstrucción para la base DCT.

		Matrices de Submuestreo						
		a	b	c	d	e	f	
T = 0.35	Experimentos	HMBC	3,13E-03	3,29E-03	2,14E-03	4,43E-03	2,34E-03	2,78E-03
		HSQC	7,38E-04	7,74E-04	7,35E-04	8,32E-04	7,40E-04	7,68E-04
		HMBC	1,13E-05	1,44E-05	9,32E-06	1,89E-05	1,01E-05	1,18E-05
		JRES	1,29E-02	1,55E-02	8,97E-03	1,86E-02	1,10E-02	1,18E-02
		COSY	1,62E-03	2,03E-03	1,28E-03	2,69E-03	1,52E-03	2,06E-03
		TOCSY	9,79E-03	1,14E-02	9,52E-03	1,37E-02	1,04E-02	1,07E-02
		Promedio	4,70E-03	5,50E-03	3,78E-03	6,72E-03	4,35E-03	4,69E-03

Tabla 5. Errores de reconstrucción para la base Wavelet.

		Matrices de Submuestreo						
		a	b	c	d	e	f	
T = 0.35	Experimentos	HMBC	5,38E-03	3,32E-03	6,01E-03	1,03E-01	2,40E-03	2,79E-03
		HSQC	1,75E-03	1,50E-03	1,41E-03	2,04E-03	1,11E-03	7,58E-04
		HMBC	1,02E-03	6,93E-04	9,57E-06	8,50E-04	1,26E-03	1,06E-03
		JRES	1,19E-02	1,54E-02	9,25E-03	2,64E-02	1,13E-02	1,07E-02
		COSY	1,90E-03	2,05E-03	1,31E-03	2,11E-02	1,61E-03	1,71E-03
		TOCSY	1,17E-02	1,11E-02	8,92E-03	1,73E-02	1,06E-02	1,17E-02
		Promedio	5,60E-03	5,67E-03	4,48E-03	2,84E-02	4,72E-03	4,78E-03

Tabla 6. Comparación de los errores promedios para cada una de las bases de representación dispersa.

Matrices de Submuestreo						
	a	b	c	d	e	f
Matriz Identidad	4,81E-03	5,20E-03	3,80E-03	6,73E-03	4,35E-03	4,23E-03
DCT	4,70E-03	5,50E-03	3,78E-03	6,72E-03	4,35E-03	4,69E-03
Wavelet	5,60E-03	5,67E-03	4,48E-03	2,84E-02	4,72E-03	4,78E-03

En la Tabla 6 se muestran los errores promedio de las Tabla 3, Tabla 4 y Tabla 5. Se puede observar que la matriz identidad, como base de representación, tiene los errores más bajos para todas las matrices de submuestreo propuestas.

También se puede concluir que la matriz de submuestreo con menor error es la matriz c, por lo que para los siguientes experimentos se usará esta matriz de submuestreo con el fin de obtener el menor porcentaje de submuestreo sin que la reconstrucción pierda calidad.

Para este experimento se usan tasas de submuestreo del 25%, 35%, 45%, 55% y 65%. Los resultados se muestran en las Figura 15, Figura 16, Figura 17, Figura 18, Figura 19 y Figura 20. Y los resultados de sus respectivos errores se muestran en la Tabla 7

Tabla 7. Comparación de los errores para cada una de las tasas de submuestreo propuestas de los 6 experimentos simulados.

		<i>T</i>					
		0.25	0.35	0.45	0.55	0.65	
Experimentos	HMBC	2,14E-03	2,14E-03	2,14E-03	2,14E-03	2,14E-03	Error
	HSQC	7,85E-04	7,48E-04	6,29E-04	5,64E-04	4,74E-04	
	HMBC	9,80E-06	9,53E-06	9,26E-06	9,26E-06	9,21E-06	
	JRES	9,09E-03	8,97E-03	8,92E-03	8,83E-03	8,78E-03	
	COSY	1,28E-03	1,28E-03	1,28E-03	1,28E-03	1,28E-03	
	TOCSY	1,11E-02	8,95E-03	8,62E-03	7,31E-03	6,30E-03	

Al observar las tablas con los errores se concluye que entre más porcentaje de la tasa de submuestreo, menor va a ser el error de reconstrucción y que para algunos experimentos los errores son muy pequeños por lo que visualmente no genera algún cambio que se pueda detectar.

Al graficar las imágenes se utilizó el comando *contour* de Matlab que permite graficar contornos. En las imágenes se graficó con el mismo número de contornos para observar la variación de definición en relación con la tasa de submuestreo, dicha diferencia se puede observar más claramente en la Figura 16 y Figura 20

donde a mayor tasa de submuestreo, mayor es la definición de la figura y su error es menor. Lo que nos interesa en las figuras son los picos de más alta intensidad ya que nos proveen toda la información necesaria, Matlab permite variar el número de contornos con los que se grafica, por lo que la mínima tasa de submuestreo que se puede utilizar sin perder tanta información es utilizando el 35% de la datos. De esta manera se conserva la información más importante del espectro.

Figura 15. Experimento HMBC con matriz de submuestreo c. (a) Espectro original. (b) Espectro reconstruido 25%. (c) Espectro reconstruido 35%. (d) Espectro reconstruido 45%. (e) Espectro reconstruido 55%. (f) Espectro reconstruido 65%.

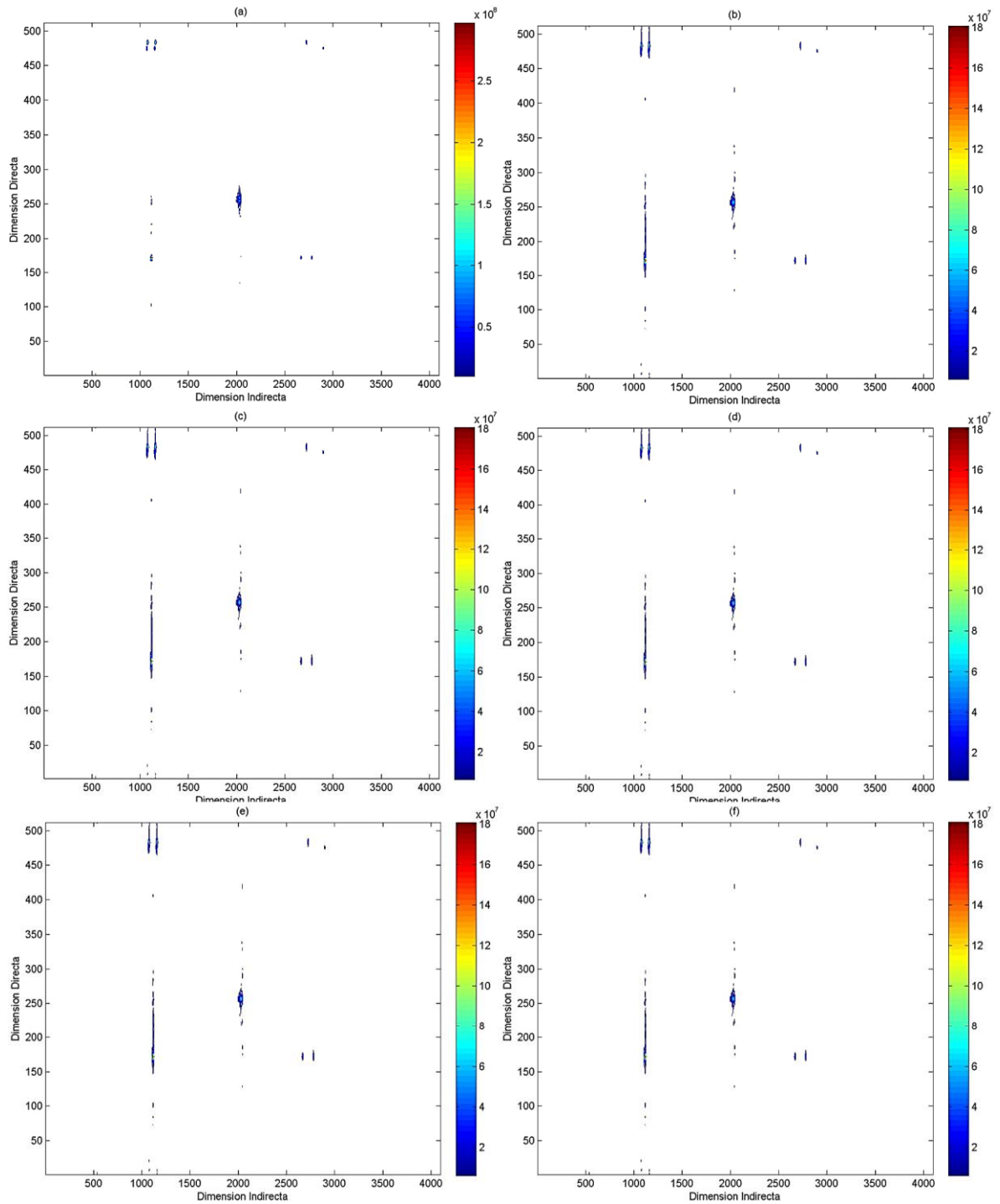


Figura 16. Experimento HSQC con matriz de submuestreo c. (a) Espectro original. (b) Espectro reconstruido 25%. (c) Espectro reconstruido 35%. (d) Espectro reconstruido 45%. (e) Espectro reconstruido 55%. (f) Espectro reconstruido 65%.

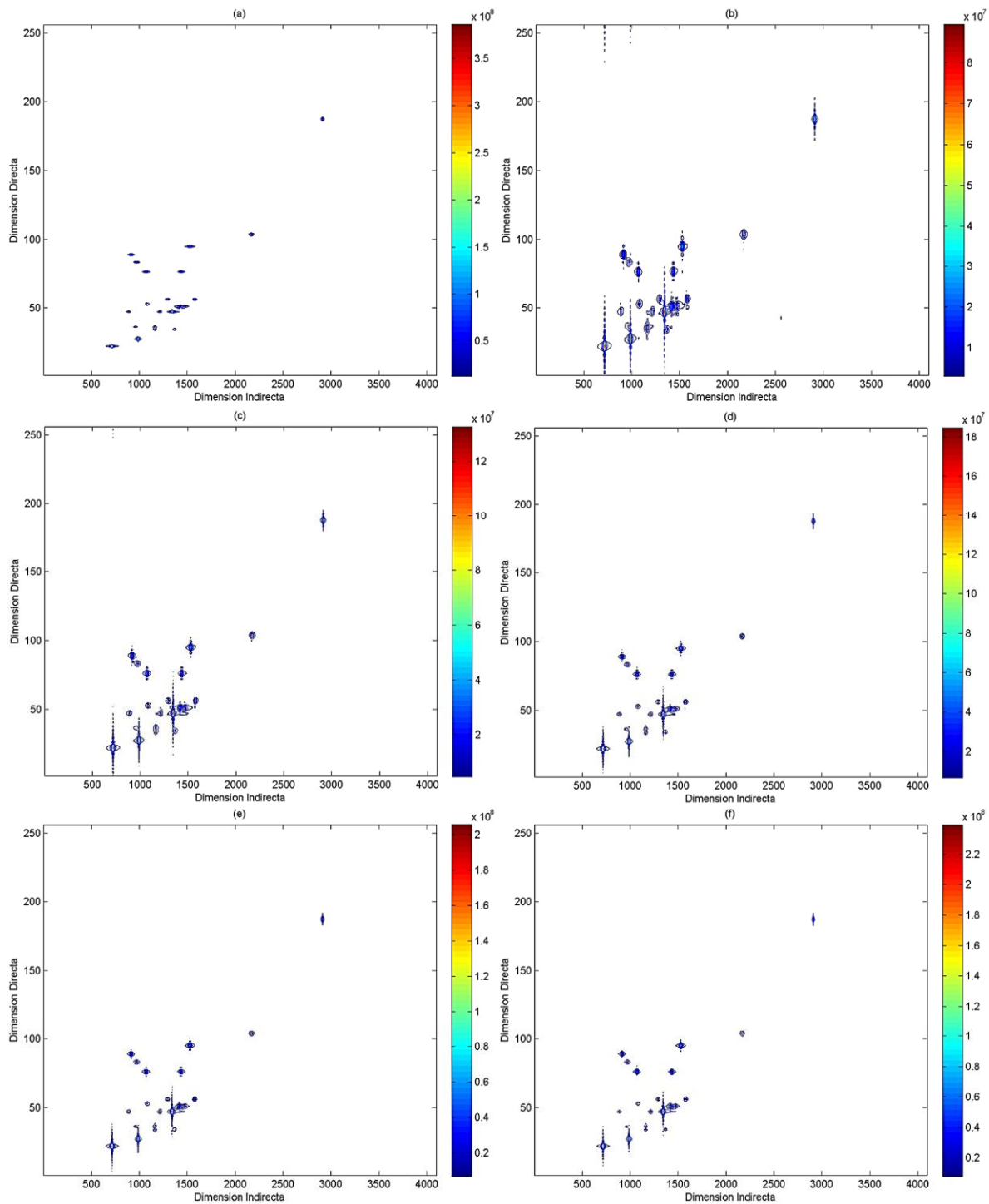


Figura 17. Experimentos HMBC con matriz de submuestreo c. (a) Espectro original. (b) Espectro reconstruido 25%. (c) Espectro reconstruido 35%. (d) Espectro reconstruido 45%. (e) Espectro reconstruido 55%. (f) Espectro reconstruido 65%.

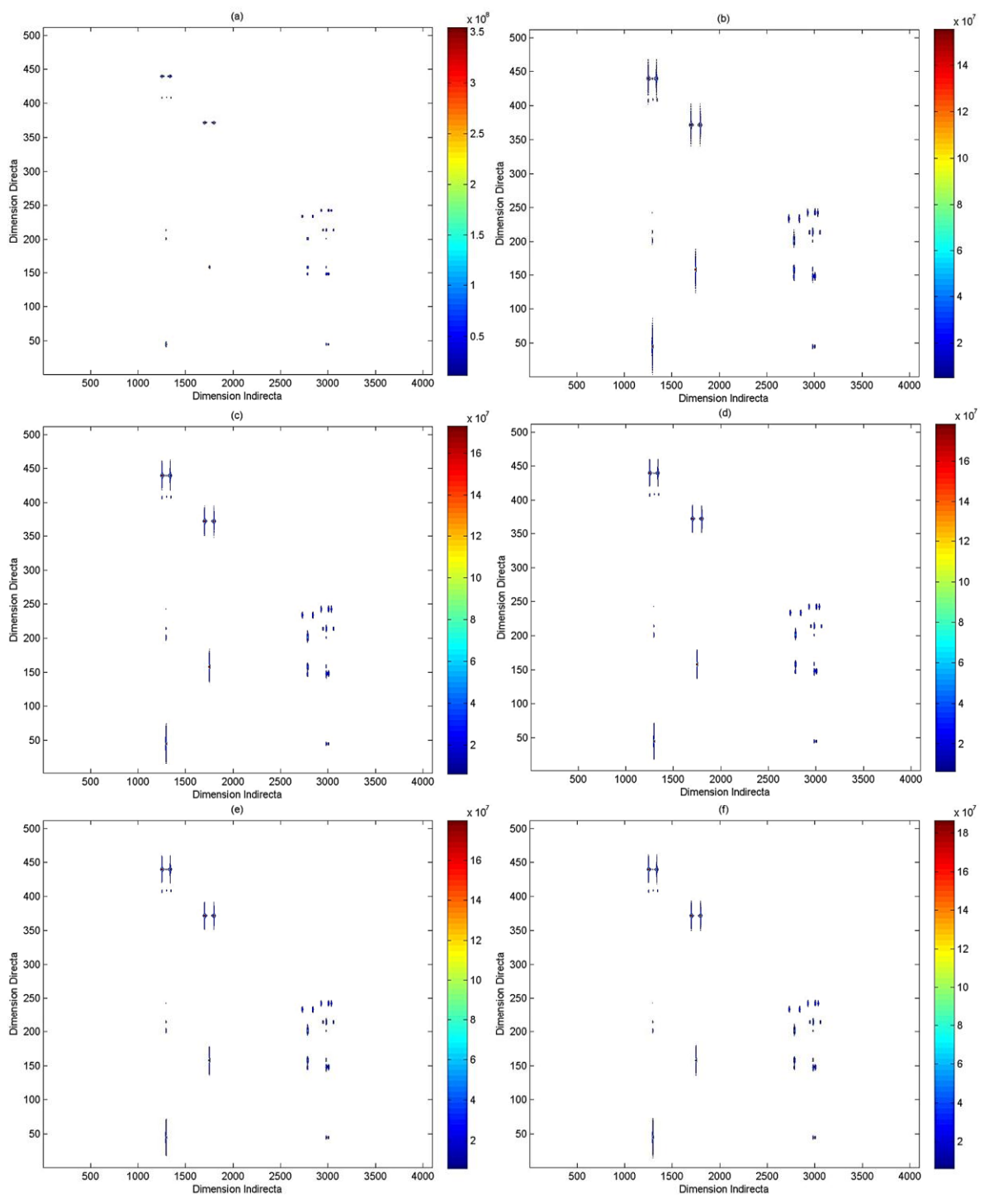


Figura 18. Experimento JRES con matriz de submuestreo c. (a) Espectro original. (b) Espectro reconstruido 25%. (c) Espectro reconstruido 35%. (d) Espectro reconstruido 45%. (e) Espectro reconstruido 55%. (f) Espectro reconstruido 65%.

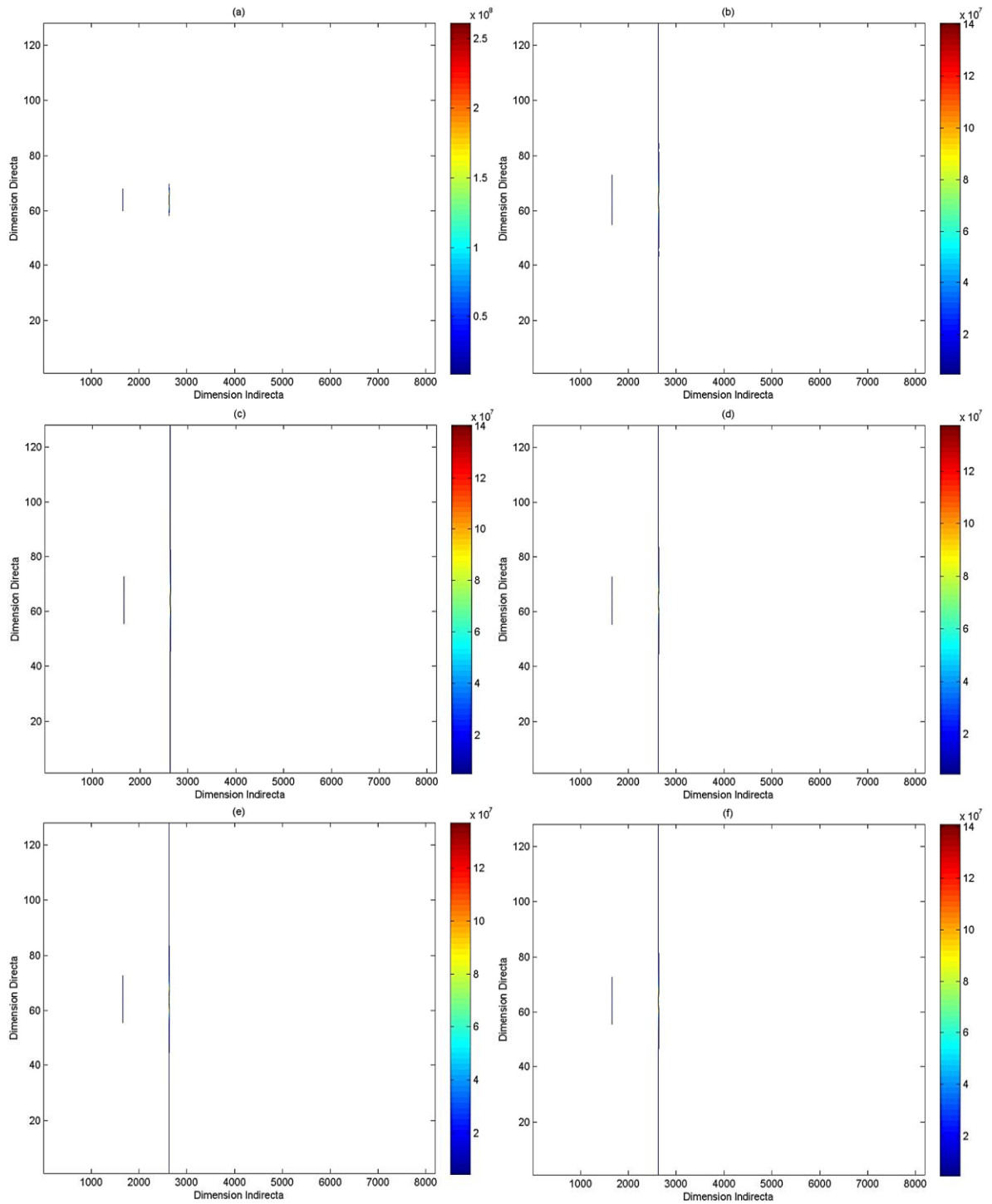


Figura 19. Experimento COSY con matriz de submuestreo c. (a) Espectro original. (b) Espectro reconstruido 25%. (c) Espectro reconstruido 35%. (d) Espectro reconstruido 45%. (e) Espectro reconstruido 55%. (f) Espectro reconstruido 65%.

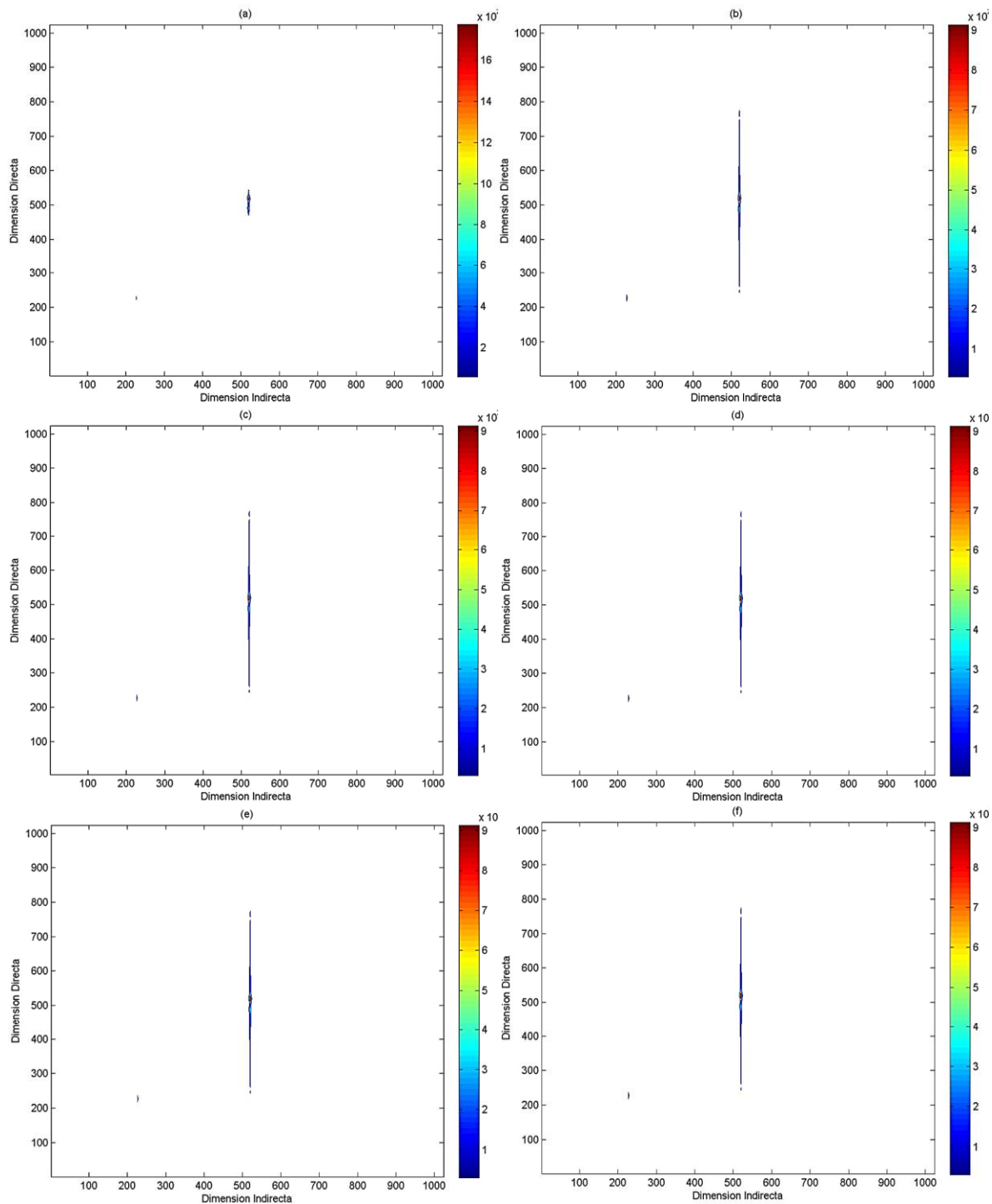
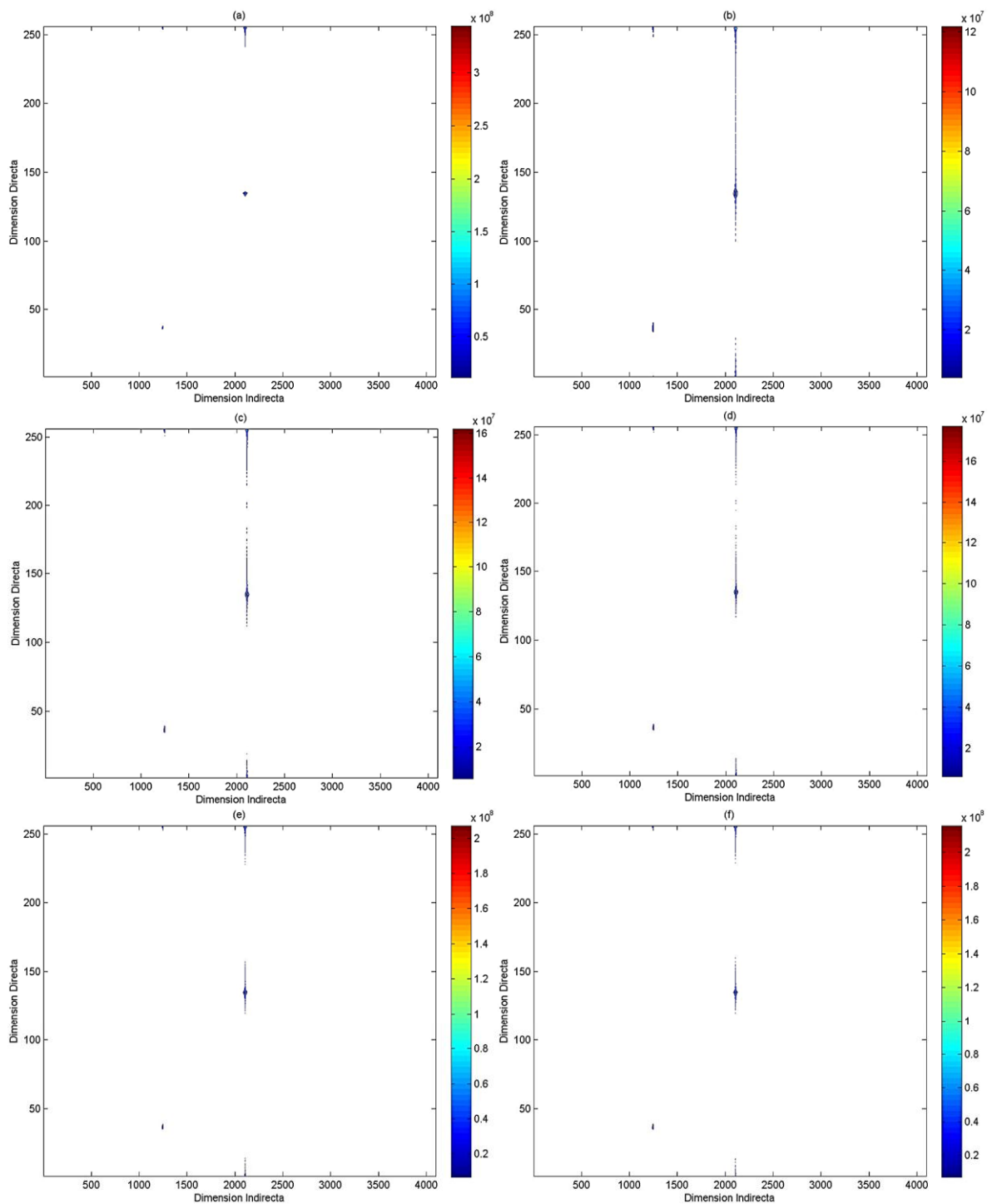


Figura 20. Experimento TOCSY con matriz de submuestreo c. (a) Espectro original. (b) Espectro reconstruido 25%. (c) Espectro reconstruido 35%. (d) Espectro reconstruido 45%. (e) Espectro reconstruido 55%. (f) Espectro reconstruido 65%.



Por último se incluye ruido en el espectro para calcular cuánto afecta la reconstrucción. Para esta simulación se utilizó un **snr** (función que incorpora ruido arbitrariamente al espectro dependiendo del parámetro snr) de 5, 10, 20, 30 y una tasa de submuestreo de 35%. Los resultados de las reconstrucciones con ruido se muestran en la Tabla 8.

Tabla 8. Comparación de los errores para cada una de las cantidades de ruido propuestas para los cuatro experimentos seleccionados.

		Ruido(SNR)				
		5	10	20	30	
Experimentos	HMBC	2,16E-03	2,14E-03	2,14E-03	2,14E-03	Error
	HSQC	7,75E-04	6,92E-04	6,96E-04	6,55E-04	
	COSY	1,29E-03	1,28E-03	1,28E-03	1,28E-03	
	TOCSY	9,52E-03	8,97E-03	9,98E-03	9,13E-03	

Al incluir ruido a las simulaciones se puede concluir que a mayor cantidad de ruido el error de la reconstrucción no se comporta de forma consistente, por lo que no se ve muy afectada comparándola con la reconstrucción sin ruido pero al observar las figuras es posible notar que los espectros reconstruidos varían visualmente, como se ilustra en las Figura 21, Figura 22, Figura 23 y Figura 24. En las figuras se observa que no se logra diferenciar los picos gracias al ruido incluido y no varía en gran medida si se grafica con más o con menos contornos.

Figura 21. Experimento HMBC con ruido. (a) Espectro original. (b) Espectro reconstruido con $\text{snr}=5$. (c) Espectro reconstruido con $\text{snr}=10$. (d) Espectro reconstruido con $\text{snr}=20$. (e) Espectro reconstruido con $\text{snr}=30$.

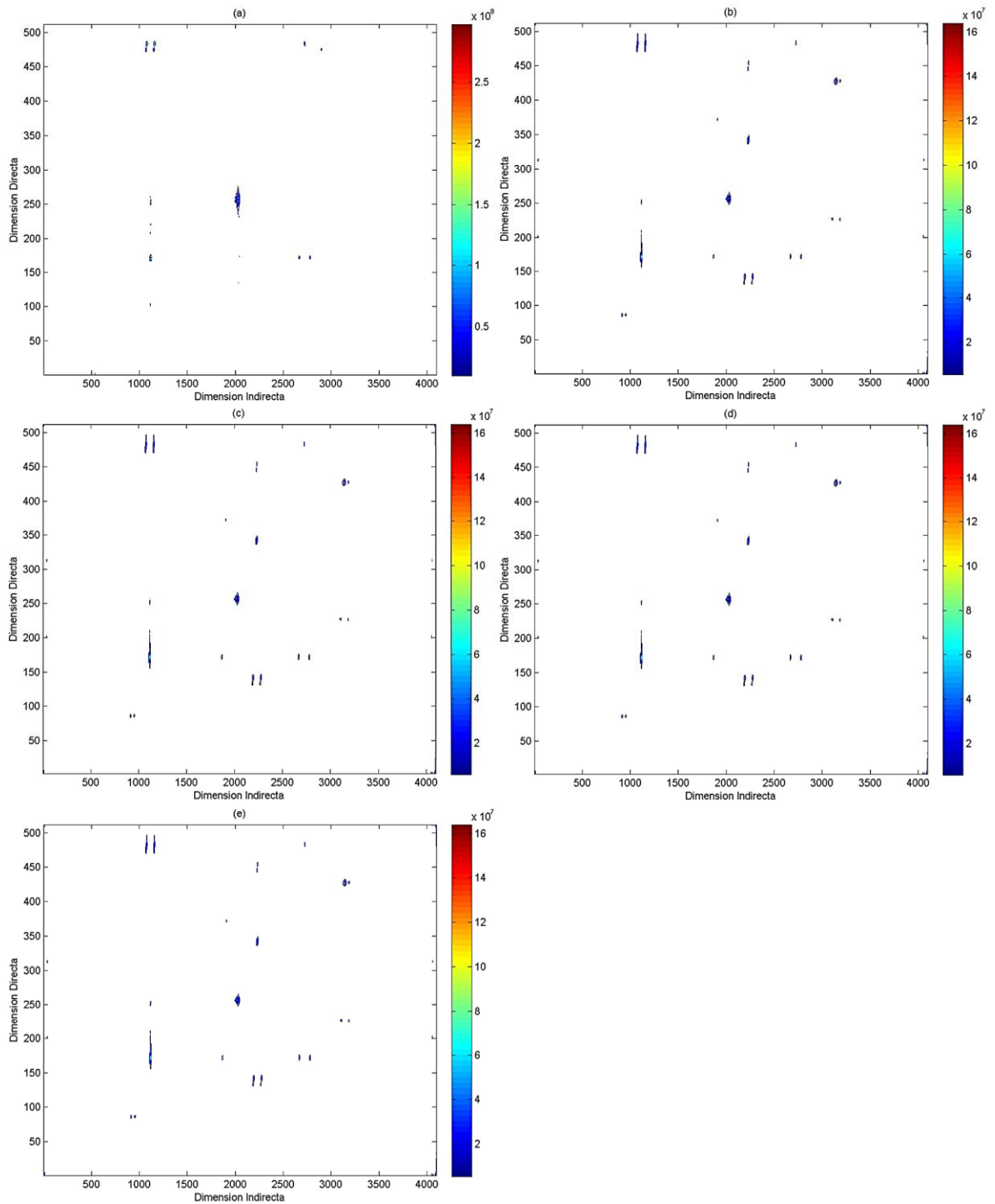


Figura 22. Experimento HSQC con ruido. (a) Espectro original. (b) Espectro reconstruido con $\text{snr}=5$. (c) Espectro reconstruido con $\text{snr}=10$. (d) Espectro reconstruido con $\text{snr}=20$. (e) Espectro reconstruido con $\text{snr}=30$.

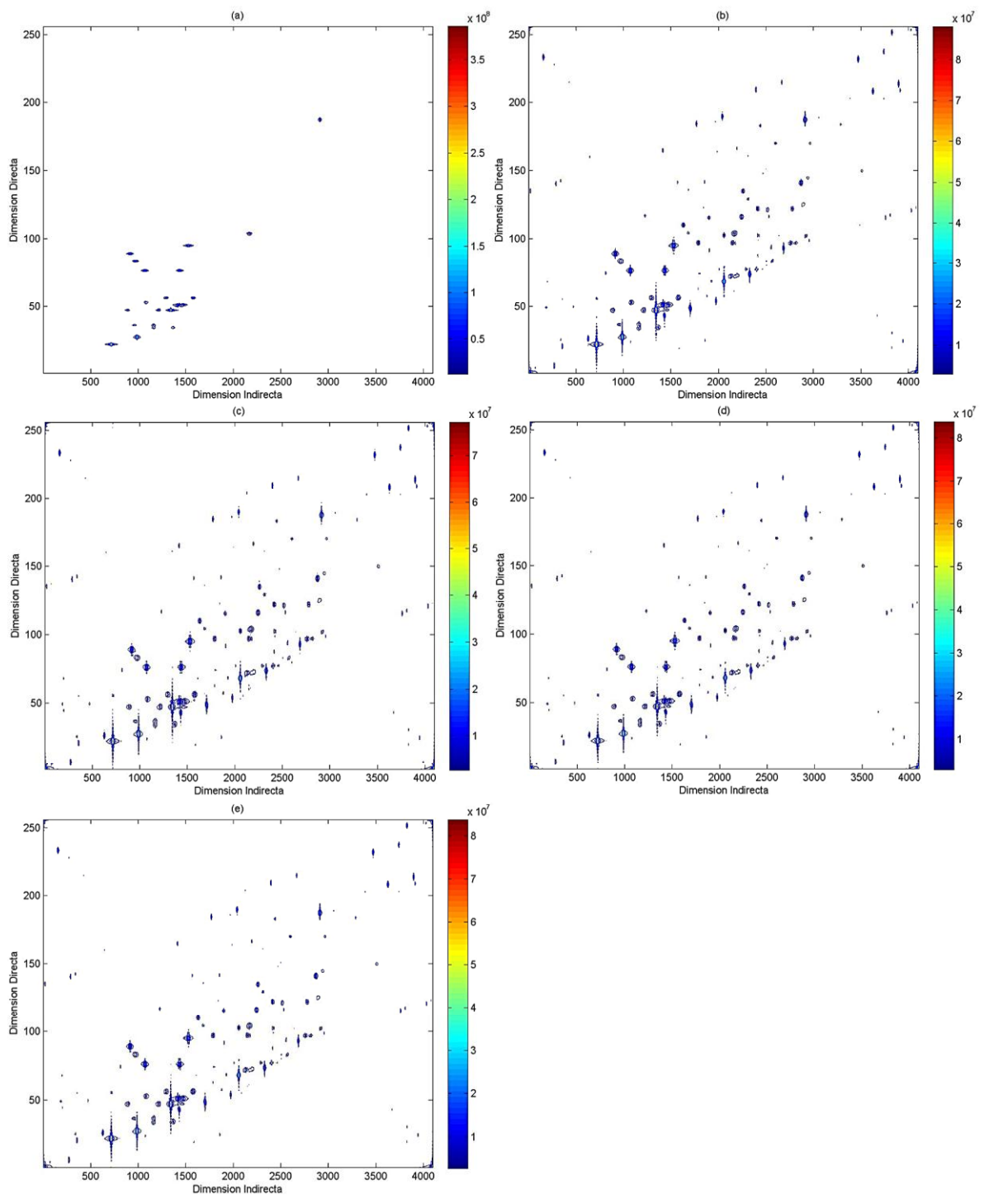


Figura 23. Experimento COSY con ruido. (a) Espectro original. (b) Espectro reconstruido con $\text{snr}=5$. (c) Espectro reconstruido con $\text{snr}=10$. (d) Espectro reconstruido con $\text{snr}=20$. (e) Espectro reconstruido con $\text{snr}=30$.

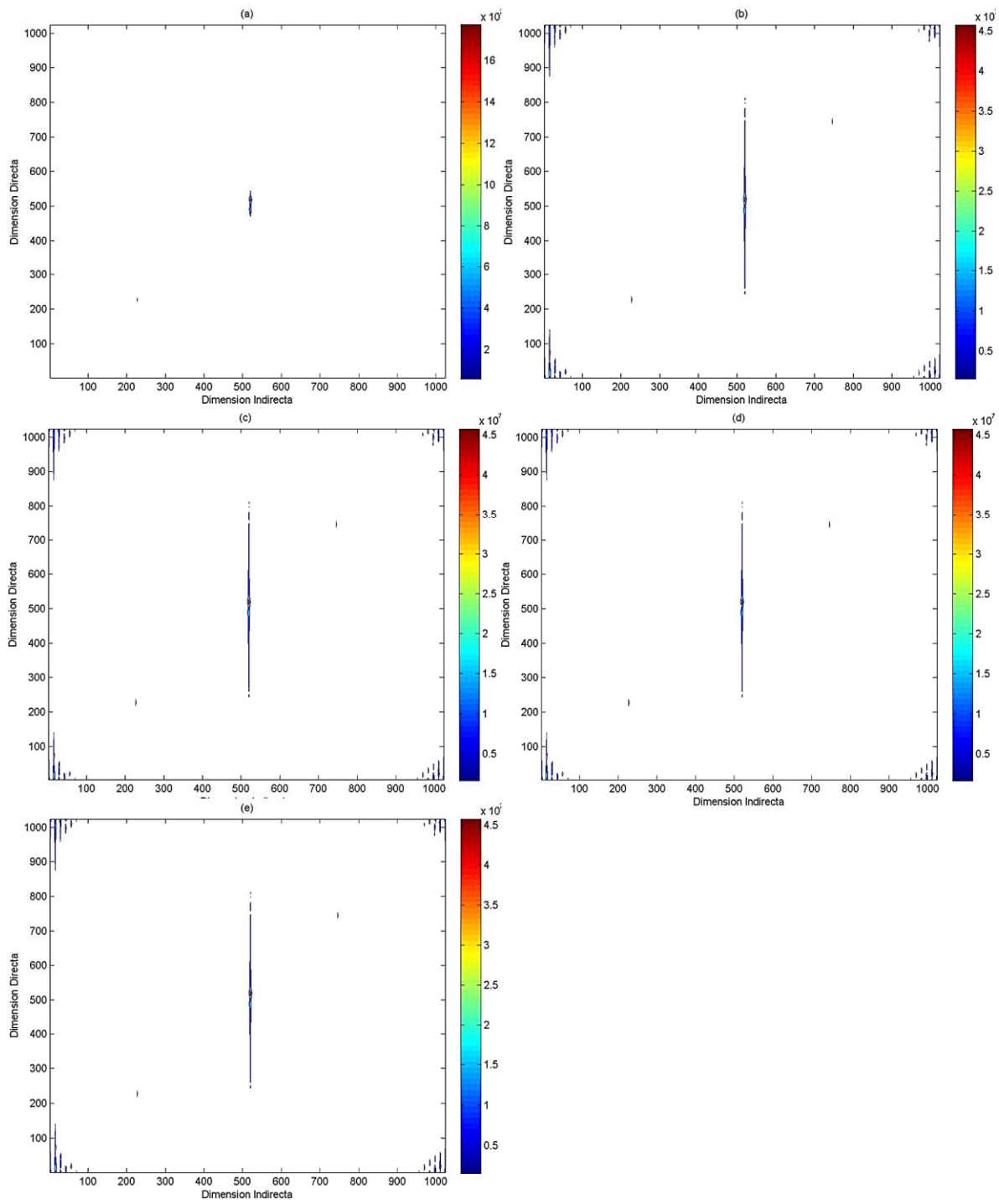
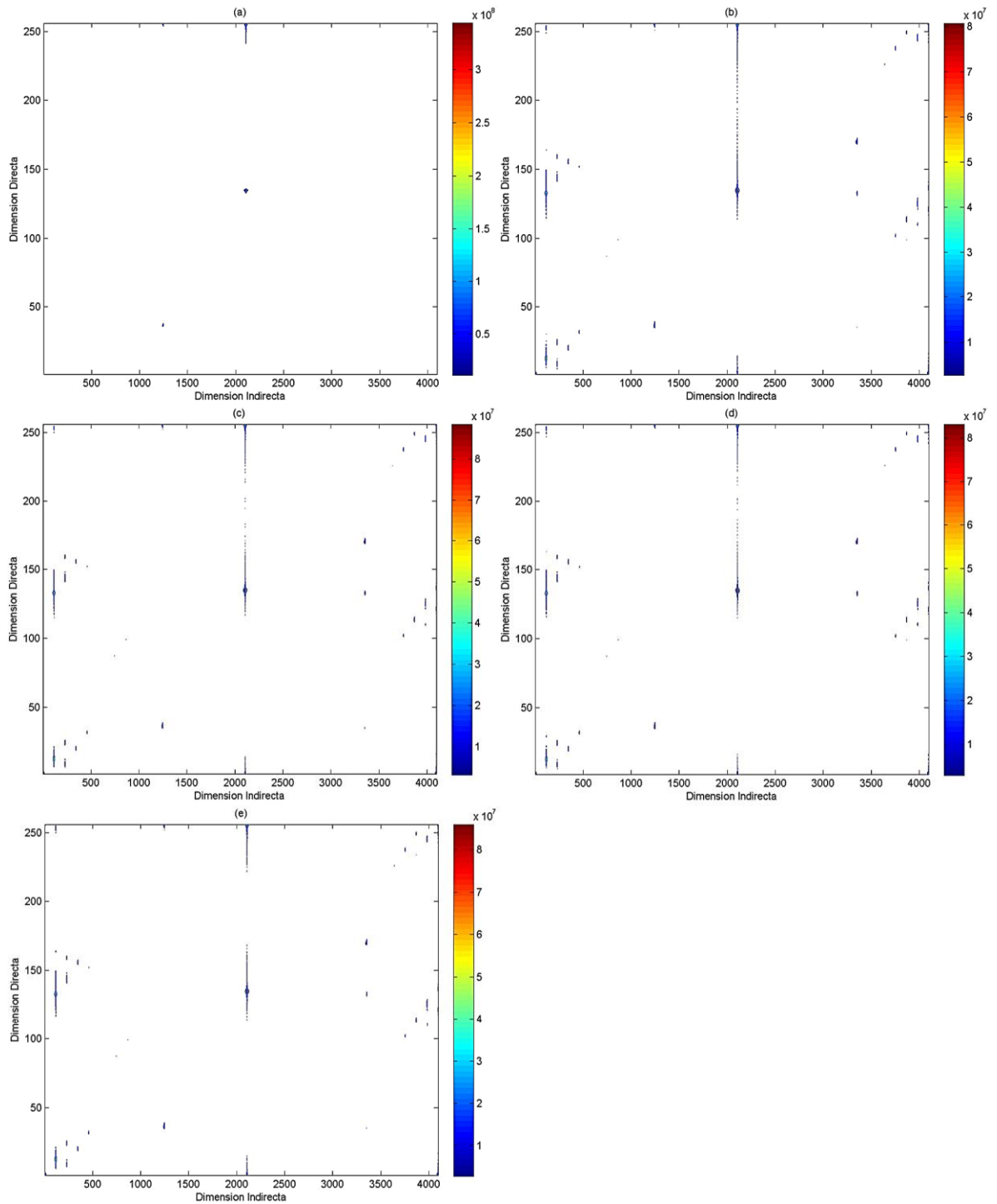


Figura 24. Experimento TOCSY con ruido. (a) Espectro original. (b) Espectro reconstruido con $\text{snr}=5$. (c) Espectro reconstruido con $\text{snr}=10$. (d) Espectro reconstruido con $\text{snr}=20$. (e) Espectro reconstruido con $\text{snr}=30$.



5. SIMULACIÓN Y RESULTADOS CON DATOS DE LABORATORIO

Adicionalmente, se hicieron otras simulaciones con datos obtenidos del laboratorio de resonancia magnética de la sede de la Universidad Industrial de Santander, Gütigüara, en donde están trabajando con moléculas de líquidos iónicos para producir disolventes no volátiles.

Las simulaciones se realizaron a dos moléculas de líquidos iónicos en donde se construyó una base de datos con dichos espectros, ya que están en formato bruker, por confidencialidad del laboratorio vamos a llamar a estas moléculas Molécula A y Molécula B, en donde a cada molécula se le realizaron tres experimentos, el COSY, el HMBC, el HSQC, y donde la tasa de submuestreo (T) se varió como se muestra en la Tabla 9, y cuyas reconstrucciones se ilustran en la Figura 25, Figura 26, Figura 27, Figura 28, Figura 29 y Figura 30.

Tabla 9. Comparación de los errores de los 6 experimentos para cada una de las tasas de submuestreo.

		T				
		0.25	0.35	0.45	0.55	0.65
Molécula A	COSY	4,62E-03	4,55E-03	4,49E-03	4,42E-03	4,36E-03
	HMBC	8,65E-04	8,64E-04	8,63E-04	8,62E-04	8,61E-04
	HSQC	5,19E-03	5,19E-03	5,19E-03	5,19E-03	5,19E-03
Molécula B	COSY	2,08E-03	2,08E-03	2,08E-03	2,08E-03	2,08E-03
	HMBC	8,79E-05	8,77E-05	8,77E-05	8,77E-05	8,76E-05
	HSQC	2,54E-03	2,54E-03	2,54E-03	2,54E-03	2,54E-03

Entre más pequeño es el error cuadrático medio más consistencia tiene el espectro reconstruido con respecto al original, haciendo que la medida de dispersión sea más pequeña y la reconstrucción sea mas confiable.

Figura 25. Molécula A, experimento COSY. (a) Espectro original. (b) Espectro reconstruido 25%. (c) Espectro reconstruido 35%. (d) Espectro reconstruido 45%. (e) Espectro reconstruido 55%. (f) Espectro reconstruido 65%.

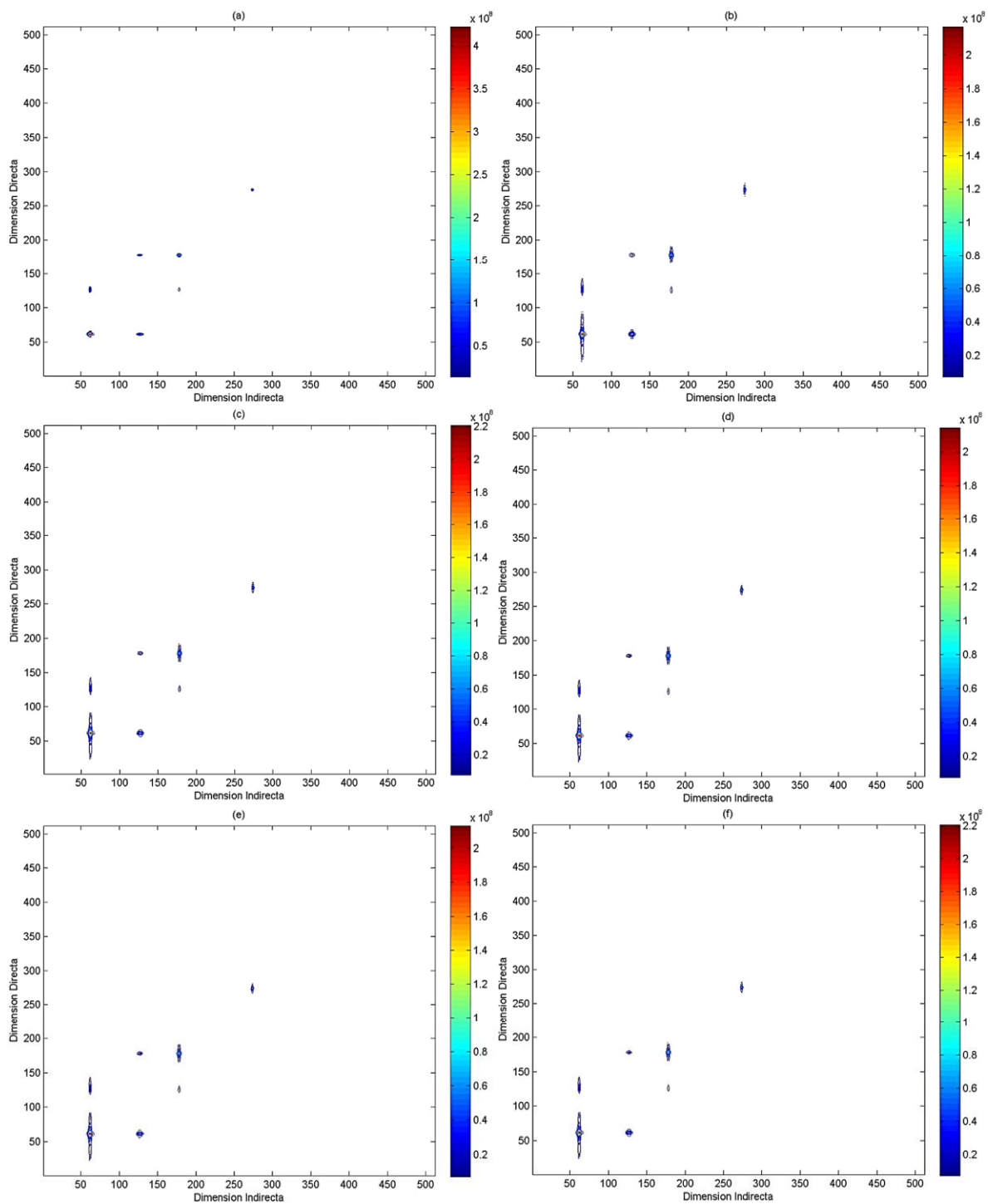


Figura 26. Molécula A, experimento HMBC. (a) Espectro original. (b) Espectro reconstruido 25%. (c) Espectro reconstruido 35%. (d) Espectro reconstruido 45%. (e) Espectro reconstruido 55%. (f) Espectro reconstruido 65%.

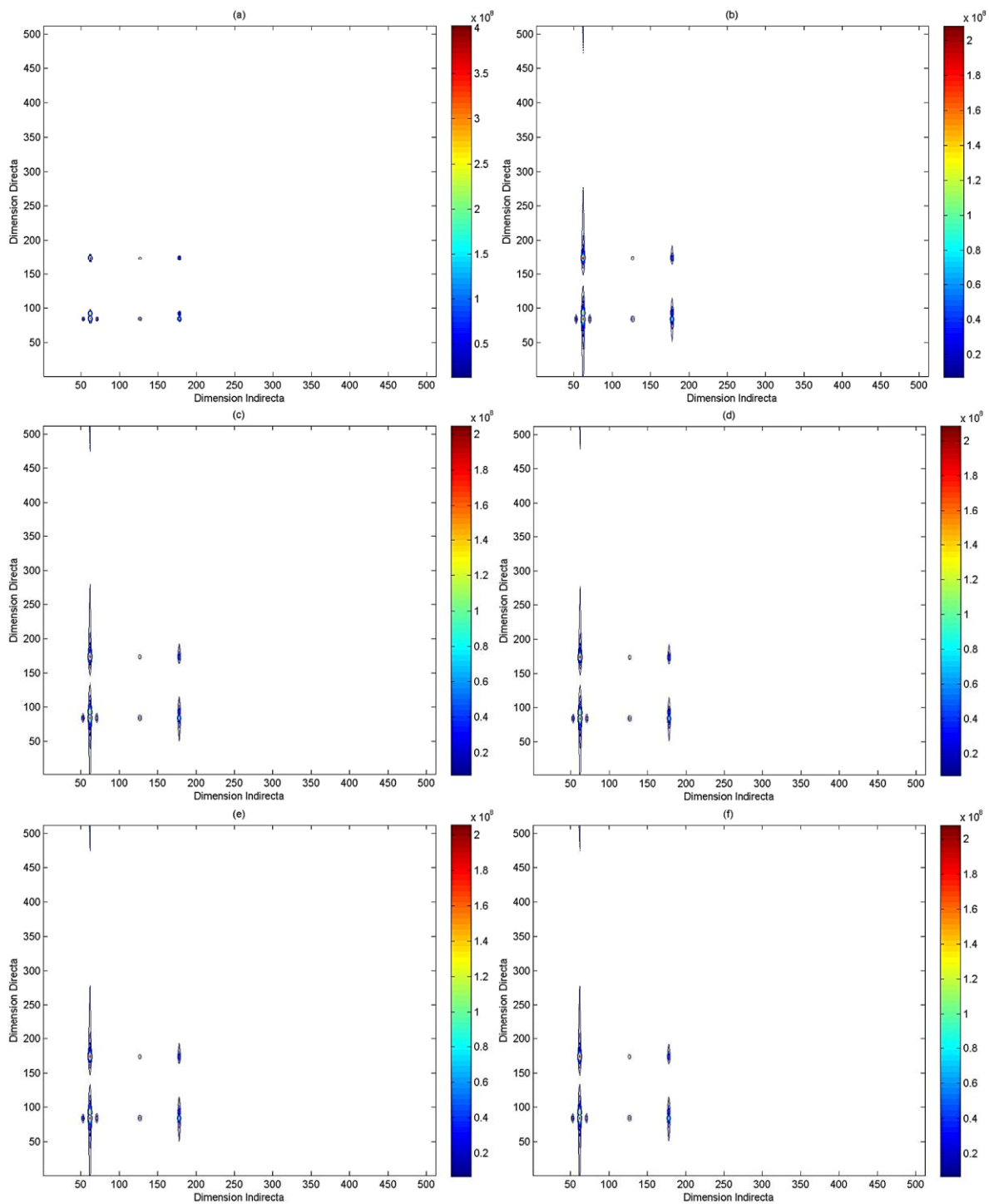


Figura 27. Molécula A, experimento HSQC. (a) Espectro original. (b) Espectro reconstruido 25%. (c) Espectro reconstruido 35%. (d) Espectro reconstruido 45%. (e) Espectro reconstruido 55%. (f) Espectro reconstruido 65%.

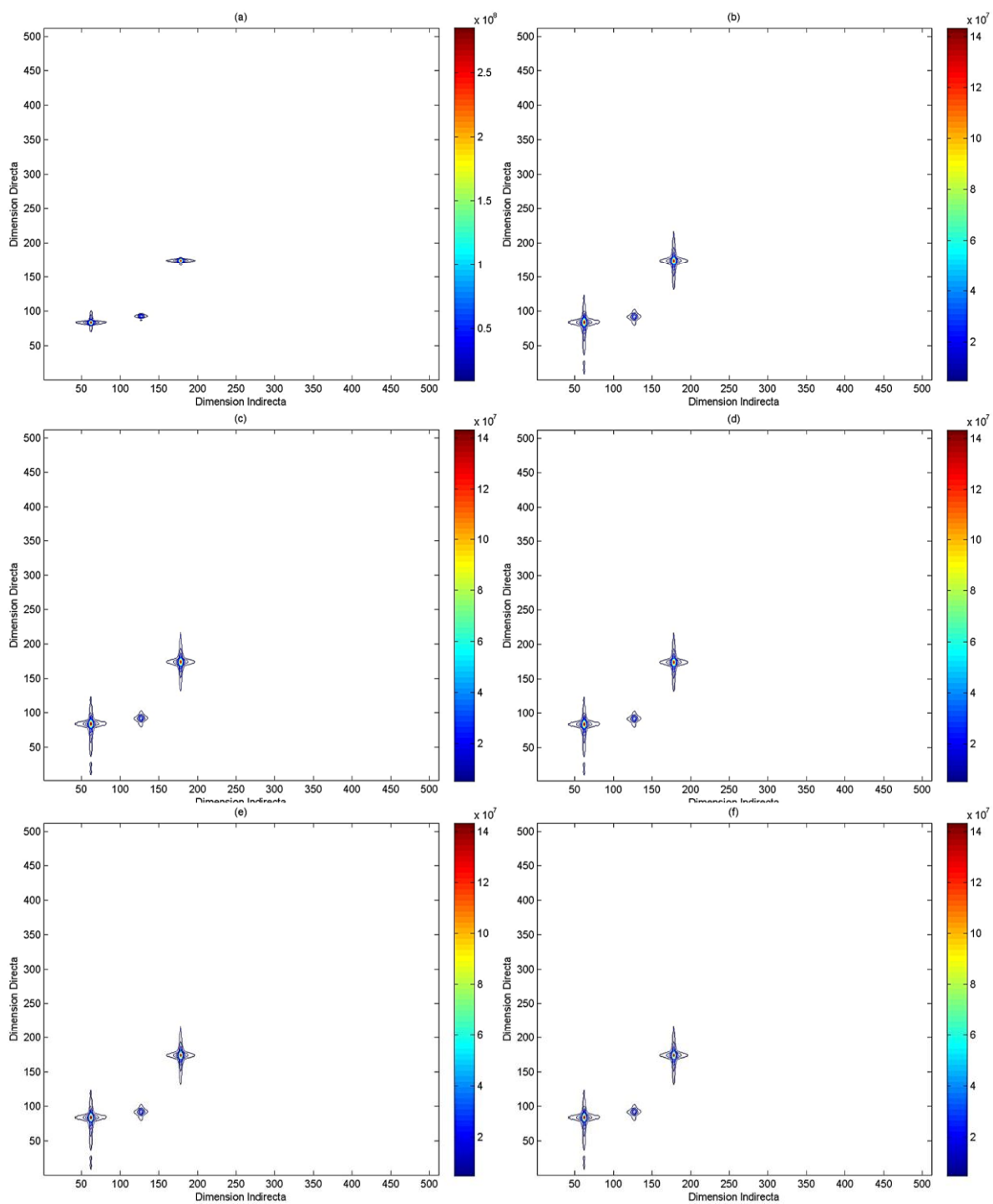


Figura 28. Molécula B, experimento COSY. (a) Espectro original. (b) Espectro reconstruido 25%. (c) Espectro reconstruido 35%. (d) Espectro reconstruido 45%. (e) Espectro reconstruido 55%. (f) Espectro reconstruido 65%.

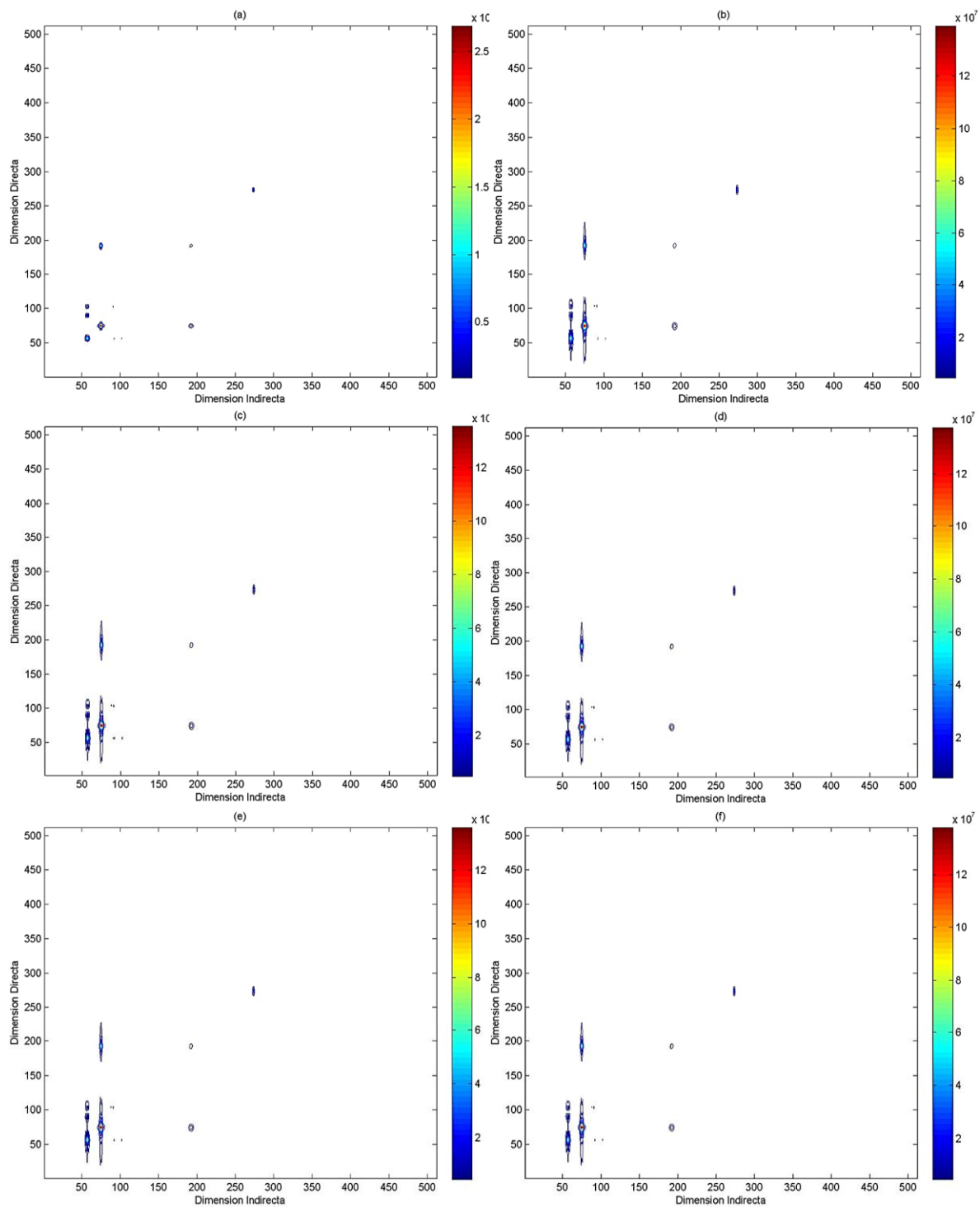


Figura 29. Molécula B, experimento HMBC. (a) Espectro original. (b) Espectro reconstruido 25%. (c) Espectro reconstruido 35%. (d) Espectro reconstruido 45%. (e) Espectro reconstruido 55%. (f) Espectro reconstruido 65%.

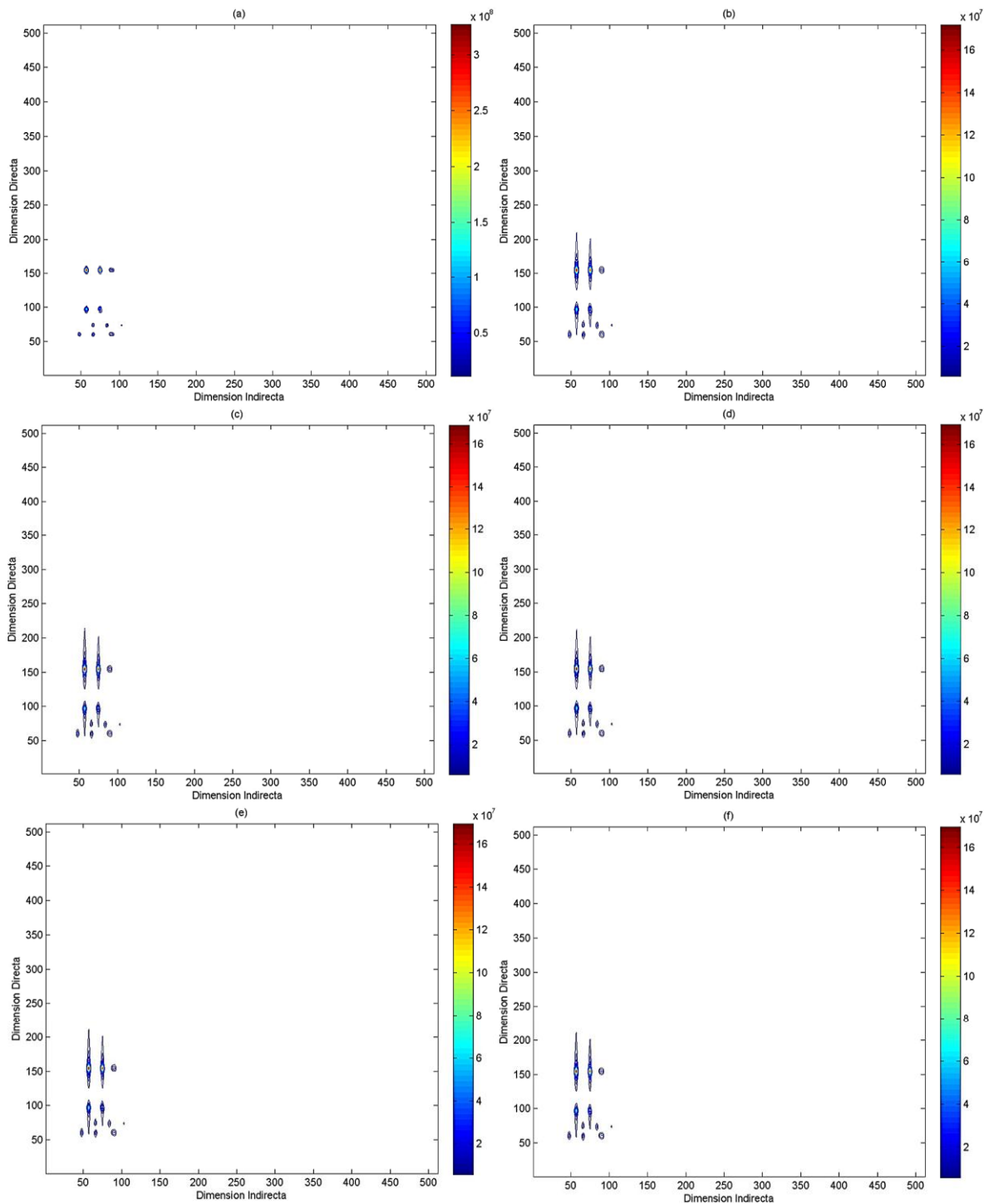
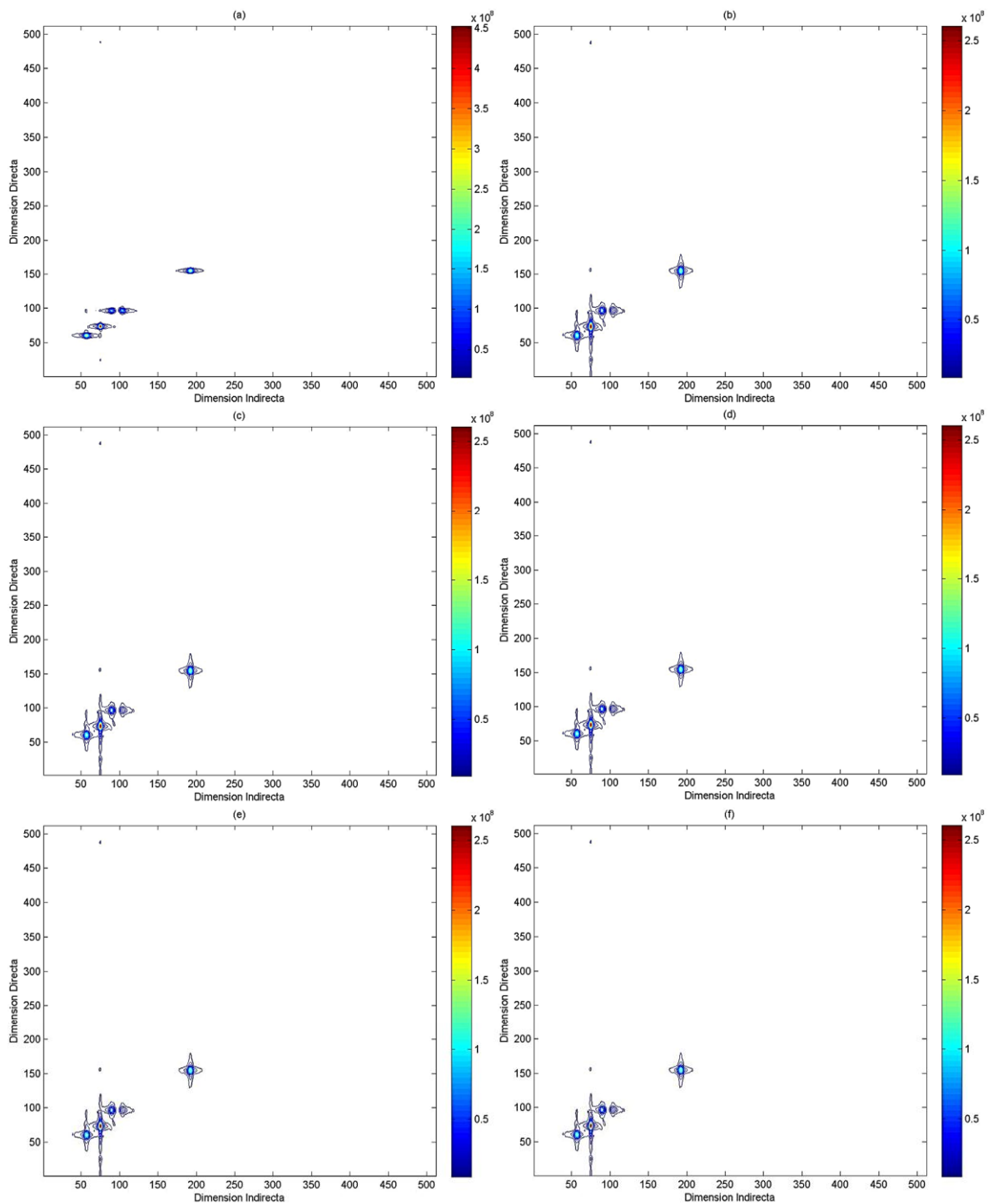


Figura 30. Molécula B, experimento HSQC. (a) Espectro original. (b) Espectro reconstruido 25%. (c) Espectro reconstruido 35%. (d) Espectro reconstruido 45%. (e) Espectro reconstruido 55%. (f) Espectro reconstruido 65%.



6. CONCLUSIONES

RMN es una técnica muy amplia que actualmente se utiliza en diversas áreas debido a que permite una mejor visualización de la estructura interna de los compuestos que se observan, esta técnica está en constante evolución ya que se requiere comprimir los tiempos de adquisición de datos sin perder calidad.

Este avance se da como respuesta a la innegable preocupación por utilizar un método que permita reducir los tiempos de adquisición de datos sin perder detalle en la reconstrucción de la imagen y cuyo método planteado fue utilizar la teoría de muestreo compresivo.

La técnica de muestreo compresivo permite comprimir una señal en el momento de la adquisición de los datos. Por lo tanto, elimina la necesidad de tomar todas las muestras impuestas por el criterio de Nyquist. Se ha propuesto una arquitectura para mediciones en resonancia magnética nuclear en la que se incluye la codificación de máscaras de submuestreo para optimizar la reconstrucción ya que se demostró que debido a que el espectro es auto-disperso no se necesita de una base de representación dispersa para ayudar a la reconstrucción. Se demostró que la codificación física puede ser utilizada para la compresión de datos en RMN.

El algoritmo planteado permitió simular el muestreo compresivo y su reconstrucción. Los resultados de dichas simulaciones indican que las máscaras seleccionadas brindan resultados óptimos en la reconstrucción de los espectros y que los algoritmos de reconstrucción usados para muestreo compresivo requieren de una menor cantidad de medidas que las que usa un algoritmo tradicional.

Adicionalmente, con el resultado de las simulaciones se encontró que la proporción de la transmitancia con la que se obtienen mejores resultados, es del 35 al 45 %. Y que la máscara más óptima es la c.

En trabajos futuros se pueden mejorar los algoritmos de reconstrucción planteados o en el mejor de los casos plantear otros algoritmos que disminuyan el error del espectro reconstruido con el espectro original.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] W. D. Carlson, "Three-dimensional imaging of earth and planetary materials," *Earth Planet. Sci. Lett.*, vol. 249, no. 3–4, pp. 133–147, 2006.
- [2] J. C. S. Boguslaw Tomanek, "Magnetic Resonance," *Biomedical Imaging: Principles and Applications.*, 2011.
- [3] J. C. Lindon, J. K. Nicholson, and J. R. Everett, "NMR Spectroscopy of Biofluids," *Annu. Reports NMR Spectrosc.*, vol. 38, no. C, pp. 1–88, 1999.
- [4] J. Prince, J.L., Links, *Medical Imaging Signals and Systems.* 2005.
- [5] E. Candès and M. Wakin, "An introduction to compressive sampling," *Signal Process. Mag. IEEE*, vol. 25, no. 2, pp. 21–30, 2008.
- [6] M. Lustig, D. L. Donoho, J. M. Santos, and J. M. Pauly, "Compressed Sensing MRI," *IEEE Signal Process. Mag.*, vol. 25, no. 2, pp. 1–18, 2008.
- [7] M. Lustig, D. Donoho, and J. M. Pauly, "Sparse MRI: The application of compressed sensing for rapid MR imaging," *Magn. Reson. Med.*, vol. 58, pp. 1182–1195, 2007.
- [8] M. Lustig, D. L. Donoho, J. M. Santos, and J. M. Pauly, "Compressed sensing MRI: A look at how CS can improve on current imaging techniques," *IEEE Signal Process. Mag.*, vol. 25, no. March 2008, pp. 72–82, 2008.
- [9] "Tema 1 RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR," vol. 1, pp. 1–36, 2012.
- [10] M. José and F. Rosales, "las imágenes médicas : Resonancia Magnética Contenidos," pp. 1–54.
- [11] E.- Madrid, D. De Química, F. De Ciencias, and S. Rey, "RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR DE PROTÓN :," pp. 1–47.
- [12] G. D. Martín, "Escalas de tiempo en RMN."
- [13] M. Lustig, D. L. Donoho, J. M. Santos, and J. M. Pauly, "Compressed Sensing MRI," *IEEE Signal Process. Mag.*, vol. 25, no. 2006, 2008.
- [14] C. E. Shannon, "Communication In The Presence Of Noise," *Proc. IEEE*, vol. 86, no. 2, pp. 447–457, Feb. 1998.
- [15] H. J. Landau, "Sampling , Data Transmission , and the Nyquist Rate," *Proc.*

- IEEE*, vol. 55, no. 10, 1967.
- [16] X. Qu, D. Guo, X. Cao, S. Cai, and Z. Chen, "Reconstruction of self-sparse 2D NMR spectra from undersampled data in the indirect dimension," *Sensors*, vol. 11, no. 9, pp. 8888–8909, 2011.
- [17] M. Rico, "Espectroscopía de Resonancia Magnética Nuclear de alta resolución : una herramienta fundamental en Química y Biología Estructural," *An. Quím.*, vol. 107, pp. 46–57, 2011.
- [18] P. De and H. Cosy, "Introducción a la RMN 2D Introducción a la RMN 2D Introducción a la RMN 2D Introducción a la RMN 2D." Introducción a la RMN 2D
- [19] E. Velasco, "Universidad Autónoma de Nuevo León."
- [20] S. Qaisar, R. M. Bilal, W. Iqbal, M. Naureen, and S. Lee, "Compressive sensing: From theory to applications, a survey," *J. Commun. Networks*, vol. 15, no. 5, pp. 443–456, Oct. 2013.
- [21] E. J. Candès, J. Romberg, and T. Tao, "Robust uncertainty principles: Exact signal reconstruction from highly incomplete frequency information," *IEEE Trans. Inf. Theory*, vol. 52, no. 2, pp. 489–509, 2006.
- [22] Má. a. T. Figueiredo, R. D. Nowak, and S. J. Wright, "Gradient Projection for Sparse Reconstruction: Application to Compressed Sensing and Other Inverse Problems," *IEEE J. Sel. Top. Signal Process.*, vol. 1, no. 4, pp. 586–597, Dec. 2007.
- [23] J. M. Bioucas-Dias and M. a T. Figueiredo, "A new TwIST: Two-step iterative shrinkage/thresholding algorithms for image restoration," *IEEE Trans. Image Process.*, vol. 16, no. 12, pp. 2992–3004, Dec. 2007.
- [24] "Compressed Sensing using Dual-Tree Complex Wavelet Transform," vol. 4, no. 2007, p. 85385, 2009.
- [25] Z. Zhu, K. Wahid, P. Babyn, and R. Yang, "Compressed sensing-based MRI reconstruction using complex double-density dual-tree DWT," *Int. J. Biomed. Imaging*, vol. 2013, 2013.
- [26] C. Chen and J. Huang, "Exploiting the wavelet structure in compressed sensing MRI," *Magn. Reson. Imaging*, vol. 32, no. 10, pp. 1377–1389, 2014.
- [27] C. Chen and J. Huang, "The benefit of tree sparsity in accelerated MRI," *Med. Image Anal.*, vol. 18, no. 6, pp. 834–842, 2014.

- [28] H. Oh and S. Lee, "Visually weighted reconstruction of compressive sensing MRI," *Magn. Reson. Imaging*, vol. 32, no. 3, pp. 270–280, 2014.
- [29] B. Jelena, "Comparison of Algorithms for Compressed Sensing of Magnetic Resonance Images," 2015.
- [30] J. N. Sanders, S. K. Saikin, S. Mostame, X. Andrade, J. R. Widom, A. H. Marcus, and A. Aspuru-Guzik, "Compressed sensing for multidimensional spectroscopy experiments," *J. Phys. Chem. Lett.*, vol. 3, no. 18, pp. 2697–2702, 2012.
- [31] E. C. Lin and S. J. Opella, "Sampling scheme and compressed sensing applied to solid-state NMR spectroscopy," *J. Magn. Reson.*, vol. 237, pp. 40–48, 2013.
- [32] E. J. Candes and M. B. Wakin, "An Introduction To Compressive Sampling," *IEEE Signal Process. Mag.*, vol. 25, no. March 2008, pp. 21–30, 2008.
- [33] S. J. Wright, S. J. Wright, R. D. Nowak, and R. D. Nowak, "SPARSE RECONSTRUCTION BY SEPARABLE APPROXIMATION Stephen J. Wright," *IEEE Trans. Signal Process.*, vol. 57, no. 7, pp. 2479–2493, 2009.
- [34] N. Vasconcelos, "Discrete Cosine Transform," 2012.
- [35] A. Graps, "An Introduction to Wavelets."

BIBLIOGRAFÍA

B. Jelena, "Comparison of Algorithms for Compressed Sensing of Magnetic Resonance Images," 2015.

BIOUCAS-DIAS, José M.; FIGUEIREDO, Mário AT. A new TwIST: Two-step iterative shrinkage/thresholding algorithms for image restoration. IEEE Transactions on Image processing, 2007, vol. 16, no 12, p. 2992-3004.

CANDÈS, Emmanuel J.; ROMBERG, Justin; TAO, Terence. Robust uncertainty principles: Exact signal reconstruction from highly incomplete frequency information. IEEE Transactions on information theory, 2006, vol. 52, no 2, p. 489-509.

CANDÈS, Emmanuel J.; WAKIN, Michael B. An introduction to compressive sampling. IEEE signal processing magazine, 2008, vol. 25, no 2, p. 21-30.

CANDÈS, Emmanuel J.; WAKIN, Michael B. An introduction to compressive sampling. IEEE signal processing magazine, 2008, vol. 25, no 2, p. 21-30.

CARLSON, William D. Three-dimensional imaging of earth and planetary materials. Earth and Planetary Science Letters, 2006, vol. 249, no 3, p. 133-147.

CHEN, Chen; HUANG, Junzhou. Exploiting the wavelet structure in compressed sensing MRI. Magnetic resonance imaging, 2014, vol. 32, no 10, p. 1377-1389.

CHEN, Chen; HUANG, Junzhou. The benefit of tree sparsity in accelerated MRI. Medical image analysis, 2014, vol. 18, no 6, p. 834-842.

E. Velasco, "Universidad Autónoma de Nuevo León."

ELGUERO, José, et al. Resonancia Magnética Nuclear de protón: Aplicaciones en química orgánica. Recuperado el, 2004, vol. 8. pp. 1-47.

FIGUEIREDO, Mário AT; NOWAK, Robert D.; WRIGHT, Stephen J. Gradient projection for sparse reconstruction: Application to compressed sensing and other inverse problems. IEEE Journal of selected topics in signal processing, 2007, vol. 1, no 4, p. 586-597.

G. D. Martín, "Escalas de tiempo en RMN."

GRAPS, Amara. An introduction to wavelets. IEEE computational science and engineering, 1995, vol. 2, no 2, p. 50-61.

J. C. S. Boguslaw Tomanek, "Magnetic Resonance," Biomedical Imaging: Principles and Applications. 2011.

KIM, Yookyung, et al. Compressed sensing using dual-tree complex wavelet transform. En Proceedings of the International Society for Magnetic Resonance in Medicine. 2009. p. 2814.

LANDAU, H. J. Sampling, data transmission, and the Nyquist rate. Proceedings of the IEEE, 1967, vol. 55, no 10, p. 1701-1706.

LIN, Eugene C.; OPELLA, Stanley J. Sampling scheme and compressed sensing applied to solid-state NMR spectroscopy. Journal of Magnetic Resonance, 2013, vol. 237, p. 40-48.

LINDON, John C.; NICHOLSON, Jeremy K.; EVERETT, Jeremy R. NMR spectroscopy of biofluids. Annual reports on NMR spectroscopy, 1999, vol. 38, p. 1-88.

LUSTIG, Michael, et al. Compressed sensing MRI. IEEE signal processing magazine, 2008, vol. 25, no 2, p. 72-82.

LUSTIG, Michael, et al. Compressed sensing MRI. IEEE signal processing magazine, 2008, vol. 25, no 2, p. 72-82.

LUSTIG, Michael, et al. Compressed sensing MRI. IEEE signal processing magazine, 2008, vol. 25, no 2, p. 72-82.

LUSTIG, Michael; DONOHO, David; PAULY, John M. Sparse MRI: The application of compressed sensing for rapid MR imaging. Magnetic resonance in medicine, 2007, vol. 58, no 6, p. 1182-1195.

OH, Heeseok; LEE, Sanghoon. Visually weighted reconstruction of compressive sensing MRI. Magnetic resonance imaging, 2014, vol. 32, no 3, p. 270-280.

PRINCE, Jerry L.; LINKS, Jonathan M. Medical Imaging Signals and Systems (2e). 2015.

QAISAR, Saad, et al. Compressive sensing: From theory to applications, a survey. Journal of Communications and networks, 2013, vol. 15, no 5, p. 443-456.

QU, Xiaobo, et al. Reconstruction of self-sparse 2D NMR spectra from undersampled data in the indirect dimension. Sensors, 2011, vol. 11, no 9, p. 8888-8909.

RASIWASIA, Nikhil; VASCONCELOS, Nuno. Holistic context models for visual

recognition. IEEE transactions on pattern analysis and machine intelligence, 2012, vol. 34, no 5, p. 902-917.

RICO, Manuel. Espectroscopía de Resonancia Magnética Nuclear de alta resolución: una herramienta fundamental en Química y Biología Estructural. En Anales de la Real Sociedad Española de Química. Real Sociedad Española de Química, 2011. p. 46-57.

SANDERS, Jacob N., et al. Compressed sensing for multidimensional spectroscopy experiments. The journal of physical chemistry letters, 2012, vol. 3, no 18, p. 2697-2702.

SHANNON, Claude Elwood. Communication in the presence of noise. Proceedings of the IRE, 1949, vol. 86, no 1. pp. 447–457, Feb. 1998.

WRIGHT, Stephen J.; NOWAK, Robert D.; FIGUEIREDO, Mário AT. Sparse reconstruction by separable approximation. IEEE Transactions on Signal Processing, 2009, vol. 57, no 7, p. 2479-2493.

ZAMORANO, Sergio, et al. Caracterización de bases de Schiff derivadas de 2-aminofenol, usando RMN 1D y 2D. Revista de la Sociedad Química del Perú, 2010, vol. 76, no 2, p. 187-193.

ZHU, Zangen, et al. Compressed sensing-based MRI reconstruction using complex double-density dual-tree DWT. Journal of Biomedical Imaging, 2013, vol. 2013, p. 10.