

Implementação do algoritmo em Matlab® do método de diagonalização filtrada para análises de sinais de ressonância magnética nuclear

João Felipe Alves da Cruz¹

Tiago Bueno Moraes²

Claudio José Magon³

Luiz Alberto Colnago⁴

¹Aluno de graduação em Engenharia Física, Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, SP; alves.joaof@gmail.com

²Aluno de doutorado em Física, Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo, São Carlos - SP;

³Professor, Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo, São Carlos - SP ⁴Pesquisador, Embrapa Instrumentação, São Carlos, SP.

Em 1990, Neuhauser introduziu um método numérico para extração de autovalores e autovetores em uma determinada faixa de energia de um sistema quântico de grande dimensão, denominando-o 'Filter Diagonalization'. Essencialmente, aplica-se um filtro de Fourier para remover a correlação entre os autoestados distantes, e então diagonalizando a matriz Hamiltoniana no subespaço, os autoestados de uma pequena faixa de energia podem ser calculados com precisão. No ano de 1997 Mandelstam estendeu o método utilizando um filtro retangular, finalmente conseguiu-se convergência, velocidade e confiabilidade no algoritmo e introduziu-se o nome "Filter Diagonalization Method" (FDM). O FDM passou a ser explorado em diversas áreas da Física onde a inversão harmônica é necessária. Em particular começou a ser utilizado na Ressonância Magnética Nuclear (RMN) passando a ser uma das mais interessantes aplicações do método. Uma excelente descrição do algoritmo foi detalhada num artigo de revisão por Mandelshtam em 2001 onde cita os principais trabalhos desenvolvidos na época e da ênfase às aplicações do método na área da RMN. Recentemente foi mostrado as vantagens e desvantagens da utilização do método da diagonalização filtrada para obtenção de espectros de alta resolução de ^1H , ^{13}C e ^{15}N usando a sequência de Precessão Livre no Estado Estacionário para RMN (RMN-SSFP) sem as distorções de fase e amplitude. Foi mostrado que com a utilização do FDM pode-se obter espectros mais rapidamente com excelente relação sinal/ruído. Com essas técnicas conseguimos suprimir a componente eco do sinal SSFP (Steady-State Free Precession) e consequentemente a supressão de sinais no espectro no domínio da frequência. O software do FDM foi desenvolvido pelo Prof. Cláudio José Magon, do Instituto de Física de São Carlos USP, e é executado no software Origin® 8.0, com rotinas em C/C++ e Fortran. Inicialmente foi desenvolvido para análise de sinais em EPR (Espectroscopia Paramagnética Eletrônica) e posteriormente foi modificado para resolver espectros de RMN-SSFP. Essa implementação no Origin® inviabiliza a construção de uma interface amigável tornando o software complexo para utilização por um não especialista. O objetivo desse projeto é programar o algoritmo do FDM na plataforma do Matlab®, implementando as facilidades para o usuário e tornando o código simples para novas aplicações. Já foi desenvolvido a versão KBDM (Krylov Basis Diagonalization Method), dois métodos de regularização: SVD (Decomposição de Valores Singulares) e Tikhonov e outras funções simples na interface. Espectros de ^1H e ^{13}C de Brucina dissolvida em DMSO (Dimetilsulfóxido) e Acetato de Etila dissolvida em CDCl_3 (Clorofórmio Deuterado), adquiridos no espectrômetro Bruker AVANCE III (600 MHz) foram processados para comparação.

Palavras-chave: FDM, RMN, Espectroscopia.

Apoio financeiro: Embrapa.

Área: Instrumentação Agropecuária.