

# Anhang D

## HLSVD

In der medizinischen Diagnostik sollen die mittels der Spektroskopie erlangten Daten vorwiegend bezüglich der Konzentration verschiedener Metaboliten, sei es nun die absolute oder eine relative, ausgewertet werden. Der Parameter-Fit kann dabei sowohl im Zeitbereich (*time domain*) [Bee92] [Kni92], oder nach der Fourier-Transformation in den Spektren, d.h. im Frequenzbereich (*frequency domain*) [Pro93], durchgeführt werden [Boo94a] [Boo94b] [Jol91].

Im Rahmen dieser Arbeit wurde der erste Ansatz gewählt und dazu Teile des MRUI (*Magnetic Resonance User Interface*) Software Paketes verwendet [Boo96].

Die Modellfunktion, die dabei an die gemessenen Daten angepaßt wird, besteht aus einer Summe exponentiell gedämpfter Oszillationen, die zu verschiedenen Zeiten  $t_n$  in gleichmäßigen Zeitabständen  $\Delta t$  abgetastet wurden (*Lorentz*-Linie im Frequenzbereich):

$$x_n = \sum_{k=1}^K c_k e^{i(\varphi_0 + \varphi_k)} e^{(\alpha_k + i\omega_k)t_n}, \quad (\text{D.1})$$

mit der reellen Amplitude  $c_k$ , dem Dämpfungsfaktor  $\alpha_k$ , der Frequenz  $\omega_k$  und der Phase  $\varphi_k$  der  $k$ -ten Resonanz ( $K = \text{Anzahl der Resonanzen}$ ). Mit  $t_n = n\Delta t$  und

$$\begin{aligned} z_k &\equiv e^{(\alpha_k + i\omega_k)\Delta t} \\ \hat{c}_k &\equiv c_k e^{i(\varphi_0 + \varphi_k)} \end{aligned} \quad (\text{D.2})$$

folgt

$$x_n = \sum_{k=1}^K \hat{c}_k z_k^n. \quad (\text{D.3})$$

Dabei gibt es keine Einschränkungen für  $t_0$  bzw.  $t_{N-1}$ , d.h.  $t_0$  muß nicht der eigentliche Zeitsprung und das Signal zum Zeitpunkt  $t_{N-1}$  nicht auf Rauschniveau abgefallen sein.

Der Fit-Prozeß kann entweder interaktiv durchgeführt werden, um Vorwissen (*prior knowledge*) mit einfließen zu lassen [Van97], wie z.B. bei VARPRO (*VARIABLE PROjection*) [Vee88], oder nicht-interaktiv als *Black Box* Verfahren, z.B. SVD (*Singular Value Decomposition*) basierte Verfahren [Pij92].

Ausgangspunkt eines solchen Verfahrens ist die rechteckige  $L \times M$  Matrix  $\mathbf{X}$ , deren Elemente  $x_{ij}$  aus den  $N$  Meßwerten  $x_n$  wie folgt gebildet wird:

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} x_0 & x_1 & x_2 & \dots & x_{M-1} \\ x_1 & x_2 & & & \vdots \\ x_2 & & & & \vdots \\ \vdots & & & & \vdots \\ x_{L-1} & \dots & \dots & \dots & x_{N-1} \end{pmatrix} \quad (\text{D.4})$$

Die spezielle Form dieser Matrix, die sogenannte Hankel Struktur, bei der für die Matrixelemente  $x_{ij} = x_{ji}$  gilt, erlaubt den Einsatz spezieller Algorithmen. Durch ein SVD-Verfahren wird diese Matrix diagonalisiert, wobei eine Einschränkung auf  $K$  Diagonalelemente möglich ist. Der Lanczos Algorithmus, der die Eigenschaften der Hankel Matrix ausnutzt, reduziert zusätzlich die Rechenzeit um den Faktor 3 - 5 (HLSVD-Methode).  $L$  ist dabei im Bereich von  $N/2$  zu wählen [Bee92]. Aus den Diagonalelementen erhält man die gesuchten  $z_k$  (s. Gleichung D.2), d.h. die Dämpfungsfaktoren  $\alpha_k$  und die Frequenzen  $\omega_k$ . Ein *least square fit* ermöglicht daraufhin die Berechnung der Amplituden  $c_k$  und Phasen  $\varphi_k$  (s. Gleichung D.3).

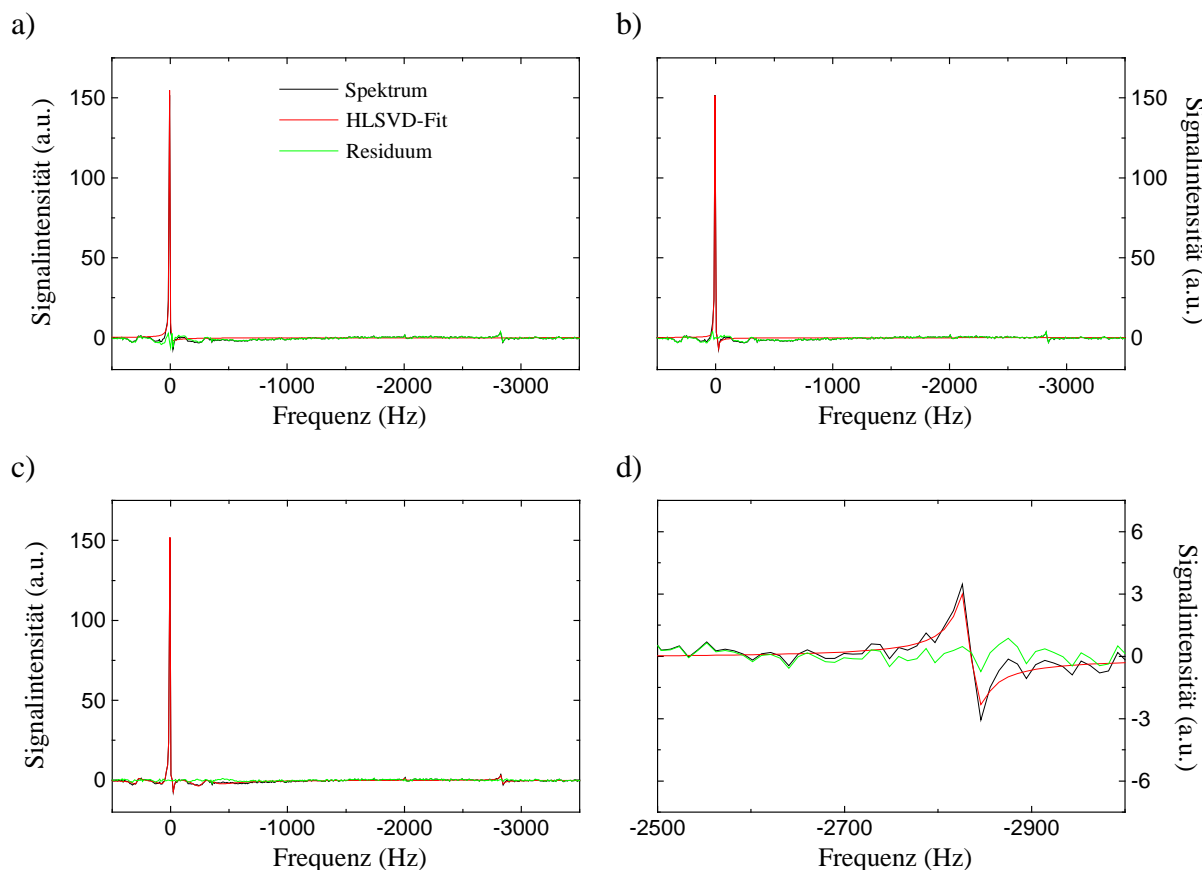
Trifft der Ansatz exponentiell gedämpfter Oszillationen nicht zu, z.B. durch den Einfluß der Feldverteilung innerhalb eines Voxels, können prinzipiell auch andere Formen gewählt werden, die z.B. entweder zu einer *Gauss*-förmigen ( $e^{\alpha t} \rightarrow e^{\alpha t + \beta t^2}$ ) oder zur *Voigt*-Linienform ( $e^{\alpha t} \rightarrow e^{\alpha t + \beta t^2 + i\omega_0 t}$ ) führen. Ein Fit mehrerer exponentiell gedämpfter Oszillationen an ein solches Signal liefert jedoch auch brauchbare Ergebnisse.

Wegen der großen Anzahl auszuwertender FIDs bei der spektroskopischen Bildgebung der Thermosonden-Methode wurde die HLSVD-Methode verwendet, auch wenn diese gegenüber interaktiven Methoden ein höheres S/R benötigt. Für die Temperaturbestimmung sind jedoch nur die Signale des Wassers bzw. der Methoxygruppe von Interesse, d.h. nur  $\omega_k$  der HLSVD-Methode wird benötigt. Weicht die Linienform der Signale von der *Lorentz*-Form ab und ist das Wassersignal deutlich stärker als das Methoxygruppen-Signal, so genügt das Anpassen zweier Resonanzen an den gemessenen FID nicht aus, da an das Wassersignal zuerst mehrere exponentiell gedämpfte Oszillationen angepaßt werden, bevor auch das Methoxygruppen-Signal „gefunden“ wird (s. Beispiel). Ein solcher FID muß dann durch mehrere Resonanzen approximiert werden (teilweise bis zu 20). Im Regelfall genügten bei den mit der 3D-CSI-Methode (s. Abschnitt 7.2.2) gemessenen FIDs jedoch 10 Resonanzen aus, wobei z.B. auch Rauschsignale angepaßt wurden. Die Resonanzfrequenz des Wassersignals wurde trotzdem durch einen Fit mit einer Resonanz ( $K = 1$ ) an den FID bestimmt (s. Beispiel).

## Beispiel

Anhand der Auswertung eines FID, der mit einer 3D-CSI-Methode aufgenommen wurde (Voxelgröße  $1 \text{ cm}^3$ , s. Abschnitt 7.2.2), wird im Folgenden kurz die spezielle Verwendung der HLSVD-Methode zur Auswertung der Daten der Thermosonden-Methode dargestellt. Die Länge des FID beträgt 1024 komplexe Datenpunkte, so daß  $L = 512$  gewählt wurde. An diesen

FID wurde eine verschiedene Anzahl von Resonanzen (1, 3 und 10) mit der HLSVD-Methode angepaßt. Die Ergebnisse sind in den Tabellen D.1 bis D.3 und in Abbildung D.1 dargestellt.



**Abbildung D.1:** Spektrum (Realteil) aus einem Voxel (Größe  $1\text{ cm}^3$ ) der mittleren Schicht des zylinderförmigen Agarosephantoms (10mM Pr-MOE-DO3A, 1% Agarose, s. Abbildung 7.11), aufgenommen mit einer 3D-CSI Sequenz (s. Abschnitt 7.2.2). (a) Mit einem, (b) drei und (c) 10 angepaßten Resonanzen. (d) Ausschnittsvergrößerung um das Methoxygruppen-Signal aus (c).

**Tabelle D.1:** Ergebnis des HLSVD-Fit mit einer angepaßten Resonanz ( $K = 1$ ).

| $k$ | $\omega_k/2\pi$ (Hz) | $\alpha_k$ (ms) | $c_k$ (a.u.) | $\varphi_k$ (deg) |
|-----|----------------------|-----------------|--------------|-------------------|
| 1   | <b>4,03</b>          | -57,91          | 3671,14      | 23,58             |

**Tabelle D.2:** Ergebnis des HLSVD-Fit mit drei angepaßten Resonanzen ( $K = 3$ ).

| $k$ | $\omega_k/2\pi$ (Hz) | $\alpha_k$ (ms) | $c_k$ (a.u.) | $\varphi_k$ (deg) |
|-----|----------------------|-----------------|--------------|-------------------|
| 1   | 11,78                | -17,45          | 1317,27      | -43,56            |
| 2   | 3,36                 | -74,17          | 2881,31      | 34,68             |
| 3   | -15,65               | -53,30          | 323,89       | 132,40            |

Da die Linienform des Wassersignals nicht exakt *Lorentz*-förmig ist, werden mehrere exponentiell gedämpfte Oszillationen an das Wassersignal im Zeitbereich angepaßt (s. Abbildung

**Tabelle D.3:** Ergebniss des HLSVD-Fit mit 10 angepaßten Resonanzen ( $K = 10$ ).

| $k$ | $\omega_k/2\pi$ (Hz) | $\alpha_k$ (ms) | $c_k$ (a.u.) | $\phi_k$ (deg) |
|-----|----------------------|-----------------|--------------|----------------|
| 1   | 4009,60              | -144,79         | 13,83        | 143,52         |
| 2   | 289,97               | -9,59           | 368,84       | -76,68         |
| 3   | 31,79                | -4,61           | 2530,08      | -68,10         |
| 4   | 17,62                | -32,86          | 426,97       | -124,15        |
| 5   | 3,40                 | -66,99          | 3205,64      | 34,74          |
| 6   | -14,97               | -46,38          | 399,26       | 119,42         |
| 7   | -259,83              | -2,64           | 2508,80      | -105,41        |
| 8   | -342,90              | -1,21           | 4457,66      | 135,74         |
| 9   | -2002,51             | -17,63          | 75,85        | 24,87          |
| 10  | <b>-2834,60</b>      | -22,21          | 252,18       | 103,45         |

D.1b). Um die Resonanzfrequenz des Wassersignals zu bestimmen, wurde deshalb nur eine Resonanz ( $K = 1$ ) an den FID angepaßt (in diesem Beispiel ergab sich für  $f_{\text{H}_2\text{O}} = 4,03$  Hz, s. Tabelle D.1 und Abbildung D.1a). Wählt man  $K = 10$ , so erhält man die Resonanzfrequenz des Methoxygruppen-Signals (in diesem Beispiel  $f_{\text{OCH}_3} = -2834,6$  Hz, s. Tabelle D.3 und Abbildung D.1c,d). Aus der Frequenzdifferenz  $\Delta f = 2838,63$  Hz resultiert nach Gleichung 7.9 eine Temperatur von  $39,4^\circ\text{C}$ .

Die Anzahl der anzupassenden Resonanzen  $K$  wurde dabei in den Experimenten des Kapitel 7 so gewählt, das bei allen auszuwertenden FIDs das Methoxygruppen-Signal angepaßt wurde. Dies führte dazu, daß in vielen FIDs auch Rauschsignale angepaßt wurde, was jedoch keinen Einfluß auf das Fit-Ergebnis hatte.

