

Simulação de Sinais Cerebrais de Espectroscopia por Ressonância Magnética

Da Criação à Corrupção (Por Ruído)

João Victor Dell Agli Floriano

Fernando Fernandes Paiva

Curso: Mestrado

Período a que se refere: 02/2025 a 05/2025

Bolsa de Estudos: CAPES

Período de Vigência: 01/08/2024 a 28/02/2026 (19 meses)

1 Resumo

1. Descrever o que é "pencil" **CONCLUIDO**
2. Implementação do MPM sem ruído **CONCLUIDO**
3. Implementação do MPM com ruído **CONCLUIDO**
4. Separação de variáveis (s0, phi, omega, T2) **CONCLUIDO**
5. Testagem do L sem ruído **CONCLUIDO**
6. Testagem do SVD sem ruído **CONCLUIDO**
7. Testagem do L com ruído
8. Testagem do SVD com ruído
9. Testagem do comportamento das variáveis separadas com a introdução de ruído de valores de sigma variados

2 Introdução

O termo "lápiz" (do inglês *pencil*), cunhado por Grantmacher [?] no contexto de *pencil* de matrizes, é uma ferramenta que combina matrizes quadradas linearmente a partir de um parâmetro λ , como descrito pela Equação 1. l é um inteiro não-negativo.

$$L(\lambda) = \sum_{i=0}^l \lambda^i A_i \quad (1)$$

No contexto de *pencil* de funções, $f(t, \lambda)$ é *pencil* de $g(t)$ e $h(t)$ quando segue o formato descrito pela Equação 2.

$$f(t, \lambda) = g(t) + \lambda h(t) \quad (2)$$

O método "lápiz de matrizes", do inglês *Matrix Pencil Method* (MPM) é uma técnica numérica de estimativa de parâmetros de sinais, desenvolvido originalmente por Yingbo Hua e Tapan Sakar [2] como uma alternativa a métodos já existentes como o de Prony [1]. O mesmo consiste em modelar os sinais como uma soma de exponenciais complexas amortecidas, como na Equação 3. Partindo dessa ideia, é então aplicada uma série de

etapas, que inclui a utilização de outros métodos, como Decomposição em Valores Singulares (SVD, do inglês *Singular Value Decomposition*), para estimar os parâmetros dessa função modeladora.

$$y(n) = \sum_{k=1}^M R_k e^{i(\omega_k t + \phi_k) + \alpha_k} \quad (3)$$

devo incluir uma parte sobre SVD?

3 Métodos

3.1 Implementação do MPM

A implementação do MPM em seu trabalho original é descrita originalmente de duas maneiras: a sem ruído, implementada de maneira mais simplificada; e a que leva em conta a presença de ruído, que utiliza algoritmos mais complexos, como a Decomposição em Valores Singulares (SVD, do inglês *Singular Value Decomposition*).

3.1.1 Caso sem ruído

Assumindo um sinal x de tamanho N , para o caso sem ruído, define-se duas matrizes $(N - L) \times L$, Y_1 e Y_2 , descritas pela Equação 4 e Equação 5.

$$Y_2 = \begin{bmatrix} x(1) & x(2) & \dots & x(L) \\ x(2) & x(3) & \dots & x(L+1) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ x(N-L) & x(N-L+1) & \dots & x(N-1) \end{bmatrix} \quad (4)$$

$$Y_1 = \begin{bmatrix} x(0) & x(1) & \dots & x(L-1) \\ x(1) & x(2) & \dots & x(L) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ x(N-L-1) & x(N-L) & \dots & x(N-2) \end{bmatrix} \quad (5)$$

Sendo L o parâmetro de *pencil*, importante para etapas posteriores. É possível escrever Y_1 e Y_2 como a Equação 6 e a Equação 7, sendo Z_1 descrito pela Equação 8, Z_2 descrito pela Equação 9, Z_0 descrito pela Equação 10, e enfim R , descrito pela Equação 11. Por enquanto, o parâmetro M pode ser considerado como igual a N , porém virá a assumir

valores diferentes posteriormente.

$$Y_2 = Z_1 R Z_0 Z_2 \quad (6)$$

$$Y_1 = Z_1 R Z_2 \quad (7)$$

$$Z_1 = \begin{bmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \\ z_1 & z_2 & \dots & z_M \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ z_1^{N-L-1} & z_2^{N-L-1} & \dots & z_M^{N-L-1} \end{bmatrix} \quad (8)$$

$$Z_2 = \begin{bmatrix} 1 & z_1 & \dots & z_1^{L-1} \\ 1 & z_2 & \dots & z_2^{L-1} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & z_M & \dots & z_M^{L-1} \end{bmatrix} \quad (9)$$

$$Z_0 = \text{diag}(z_1, z_2, \dots, z_M) \quad (10)$$

$$R = \text{diag}(R_1, R_2, \dots, R_M) \quad (11)$$

Considerando agora o *pencil*, descrito pela Equação 12: Reescrevendo-o a partir da Equação 6 e da Equação 7, obtém-se a Equação 13, que, reorganizada, rende a Equação 14.

$$Y_2 - \lambda Y_1 \quad (12)$$

$$Y_2 - \lambda Y_1 = Z_1 R Z_0 Z_2 - \lambda Z_1 R Z_2 \quad (13)$$

$$Y_2 - \lambda Y_1 = Z_1 R (Z_0 - \lambda I) Z_2 \quad (14)$$

Escolhendo $\lambda = z_i$ de maneira intencional, a matriz $Z_0 - \lambda I$ é zero, fazendo com que o *pencil* seja igual a zero, transformando o problema em um problema de autovalores generalizados. Encontrando os autovalores generalizados do par $\{Y_1, Y_2\}$, encontra-se os polos z_i . É possível também encontrar z_i como resultado do problema de autovalores comuns da matriz $Y_1^+ Y_2$, como na Equação 15. Y_1^+ , a matriz pseudoinversa de Moore-Penrose de Y_1 , é definida pela Equação 16, no qual H denota o conjugado transposto.

$$Y_1^+ Y_2 - \lambda I = 0 \quad (15)$$

$$Y_1^+ = (Y_1^H Y_1)^{-1} Y_1^H \quad (16)$$

Encontrados os polos z_i , basta encontrar os resíduos R_i a partir de um problema de mínimos quadrados, descritos pela Equação 17.

$$\begin{bmatrix} y(0) \\ y(1) \\ \vdots \\ y(N-1) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \\ z_1 & z_2 & \dots & z_M \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ z_1^{N-1} & z_2^{N-1} & \dots & z_M^{N-1} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} R_1 \\ R_2 \\ \vdots \\ R_M \end{bmatrix} \quad (17)$$

3.1.2 Caso com ruído

No caso com ruído, é construída a matriz generalizada Y , descrita pela Equação 18, da qual é possível extrair Y_1 e Y_2 excluindo a última e a primeira coluna, respectivamente.

$$Y = \begin{bmatrix} y(0) & y(1) & y(2) & \dots & y(L) \\ y(1) & y(2) & y(3) & \dots & y(L+1) \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ y(N-L-1) & y(N-L) & y(N-L+1) & \dots & y(N-1) \end{bmatrix} \quad (18)$$

Como citado anteriormente, o parâmetro L viria a ser importante para filtragem do ruído, sendo escolhido entre $N/3$ e $N/2$, intervalo no qual a variância dos parâmetros z_i , por conta do ruído, apresentou-se como mínima [2].

Após a construção, aplica-se uma decomposição em Valores Singulares (SVD) nessa matriz.

$$Y = U \Sigma V^H \quad (19)$$

A qual a matriz U , a matriz de vetores singulares à esquerda, contém os autovetores da matriz $Y Y^H$. V , chamada de matriz de vetores singulares à direita, contém os autovetores da matriz $Y^H Y$, e Σ , a matriz diagonal de valores singulares, contém os valores singulares de $Y Y^H$ e $Y^H Y$.

Encontradas as submatrizes, o número M de polos a serem calculados é escolhido, sendo eles os M valores singulares de Σ que mais contribuem para a matriz final. A sugestão

de exclusão segue a Equação 20, sendo σ_c o valor singular analisado, σ_{max} o maior valor singular e p a ordem do número de algarismos significativos. A partir disso, é possível filtrar os autovalores, separando os mais significativos de ruído.

$$\frac{\sigma_c}{\sigma_{max}} > 10^{-p} \quad (20)$$

Encontrado o valor singular limite de filtragem, a matriz Y' é construída a partir de Y com menos valores singulares, e a partir dela, Y'_1 e Y'_2 são derivadas. Realizada essa etapa, basta calcular os autovalores generalizados do par $\{Y'_2, Y'_1\}$, ou o autovalor da matriz $Y'^+_1 Y'_2$, e os resíduos R_i , seguindo o procedimento descrito anteriormente, concluindo o processo do MPM. O sinal pode ser reconstruído com os polos z_i e resíduos R_i pela Equação 21.

$$y(kT_s) \approx \sum_{i=1}^M R_i z_i^k, \quad k = 0, \dots, N - 1 \quad (21)$$

O algoritmo do MPM pode ser resumido, então, pelas seguintes etapas:

1. Calcular a matriz Y .
2. Calcular a SVD de Y .
3. Filtrar os valores singulares de acordo com o critério de seleção da Equação 20.
4. Reconstruir a matriz filtrada Y' .
5. Obter Y'_1 e Y'_2 a partir de Y' .
6. Calcular os autovalores generalizados do par $\{Y'_2, Y'_1\}$ ou calcular os autovalores da matriz $Y'^+_1 Y'_2$.
7. Encontrar os resíduos por meio do problema de mínimos quadrados descrita pela Equação 17.

Essas etapas foram traduzidas em um algoritmo na linguagem *python*, implementado em uma biblioteca própria customizada. Para sua implementação, foram usadas funções já prontas da biblioteca *numpy*, como a função para o cálculo da pseudoinversa de Moore-Penrose, cálculo de autovalores e de resolução de mínimos quadrados. É importante ressaltar que, por se tratar de um algoritmo com características numéricas em múltiplas etapas, algumas adaptações e aproximações foram feitas de maneira a viabilizar seu funcionamento. Foi necessário aproximar valores de saída dos cálculos dos polos z_i e resíduos R_i para zero

em casos os quais seus valores calculados eram significativamente baixos. Essa aproximação foi feita a partir de um valor limite, definido a critérios do usuário, para o qual valores abaixo ou igual ao valor limite eram truncados. Além disso, para as funções externas, foi necessário se atentar ao seus parâmetros próprios de filtro, usados em etapas intermediárias de cálculos que utilizam o SVD. Nesse último caso, foi definido como filtro de corte o valor de 10^{-7} .

3.2 Separação de variáveis

Com o intuito de melhorar o controle e entendimento dos parâmetros calculados pelo MPM, foi feita uma correspondência entre os polos z_i e resíduos R_i com os parâmetros originais que compõe o sinal, nesse caso, $S_{0,i}$, ϕ_i , ω_i e $T_{2,i}$. Considerando que um sinal de Espectroscopia por Ressonância Magnética (do inglês *Magnetic Resonance Spectroscopy*, MRS) pode ser representado pela Equação 22, sua versão discreta pode ser escrita assumindo $t = kT_s$, sendo T_s o período de *sampling* do sinal, e k um inteiro representando o passo, como na Equação 23.

$$S = \sum_{i=1}^M S_{0,i} e^{j\omega_i t - \frac{t}{T_2}} e^{j\phi_i} \quad (22)$$

$$S = \sum_{i=1}^M S_{0,i} e^{j\phi_i} (e^{j\omega_i T_s - \frac{T_s}{T_2}})^k \quad (23)$$

Considerando que a aproximação feita por meio da Equação 21 é uma representação suficientemente correta do sinal, é possível estabelecer uma equivalência entre os parâmetros originais e calculados, a partir da Equação 24.

$$\sum_{i=1}^M S_{0,i} e^{j\phi_i} (e^{j\omega_i T_s - \frac{T_s}{T_2}})^k = \sum_{i=1}^M R_i z_i^k \quad (24)$$

Essa equivalência demonstra que enquanto os polos z_i representam $e^{j\omega_i T_s} e^{-\frac{T_s}{T_2}}$, os resíduos representam a multiplicação $S_{0,i} e^{j\phi_i}$. Considerando a representação polar de um número complexo, na Equação 25, é possível visualizar uma maneira simples de cálculo dos parâmetros originais a partir de z_i e R_i , concluindo que $e^{-\frac{T_s}{T_2}}$ corresponde ao módulo de z , $\omega_i T_s$ ao argumento de z , $S_{0,i}$ ao módulo de R , e ϕ_i ao argumento de R . A Tabela 1 reúne as equivalências resultantes.

$$z = Ae^{j\theta} \quad (25)$$

S_0	ϕ	ω	T_2
$ R $	$arg(R)$	$-\frac{1}{T_s} arg(z)$	$-\frac{T_s}{\log(z)}$

Tabela 1: Relação entre os parâmetros calculados e originais.

Com o cálculo dos parâmetros individuais bem estabelecidos, foi implementada uma função na biblioteca própria para realização dessa tarefa. Foi feita uma adaptação dos cálculos dos argumentos de R e z , visto que a função *arctan2* da biblioteca *numpy* retornava valores no intervalo $[-\pi, \pi)$, sendo que o desejado era o intervalo $[0, 2\pi)$. Para isso, foi somado 2π para valores negativos da função, de maneira a adequá-la às necessidades apresentadas.

3.3 Sinais de Controle

3.3.1 Sinal de controle completo

Com o objetivo de caracterizar o comportamento do algoritmo com relação às suas variáveis L e p , foi gerado um sinal de controle de comportamento previsível e variáveis geradoras conhecidas. O sinal se trata de uma simulação de MRS elaborada a partir de um algoritmo próprio, gerada a partir de parâmetros já caracterizados de metabólitos conhecidos, e fase $\phi = 0$. O mesmo foi gerado com um campo de $B_0 = 3T$, começando em $t_0 = 0.0$ s e terminando em $t_n = 1.0$ s, com um passo de $dt = \frac{1}{2048} \approx 0.0005$ s, resultando em um sinal com 2048 pontos, de maneira a se adequar ao padrão de medidas clínicas. O sinal pode ser conferido pela Figura 1.

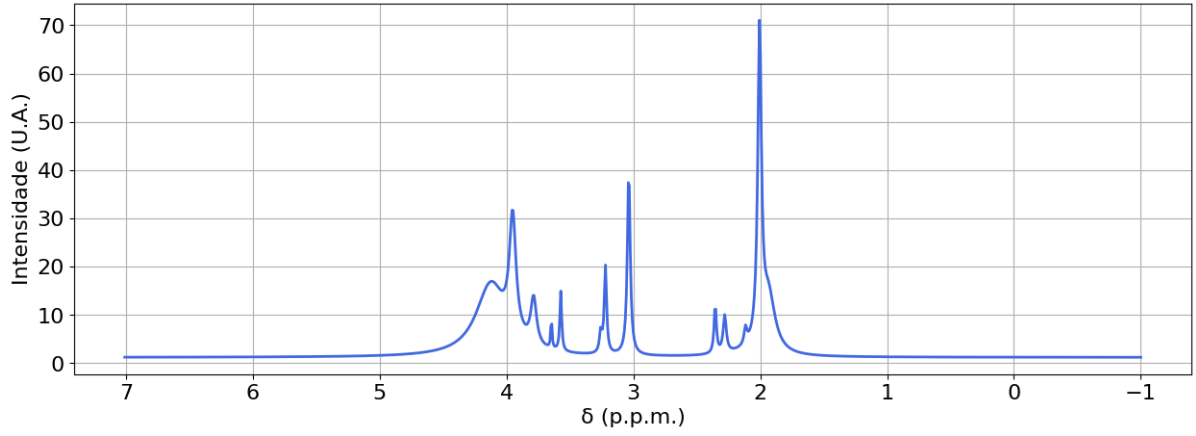


Figura 1: Sinal de controle gerado para caracterização das variáveis.

3.3.2 Sinal de controle de pico único

Além de averiguar a influência dos parâmetros tradicionais no processo do algoritmo, foi também verificada a necessidade de avaliar o comportamento dos parâmetros resultantes do processo, S_0 , ϕ , ω e T_2 , com relação à qualidade do sinal, traduzida pela sua relação sinal-ruído (do inglês, *Signal-to-Noise Ratio*, SNR). Para prosseguir, foi escolhido um novo sinal de controle: a simulação de MRS de um único metabólito, o N-Acetylaspartato, ou NAA, escolhido por ser o maior pico dentre os metabólitos comumente encontrados no cérebro. Essa escolha foi motivada pela simplificação apresentada, visto que um único pico facilitaria o processo de investigação de possíveis fenômenos associados à distorções causada pela presença de ruído. A simulação foi feita com as mesmas condições de contorno apresentadas na Subsubseção 3.3.1, podendo ser conferida pela Figura 2.

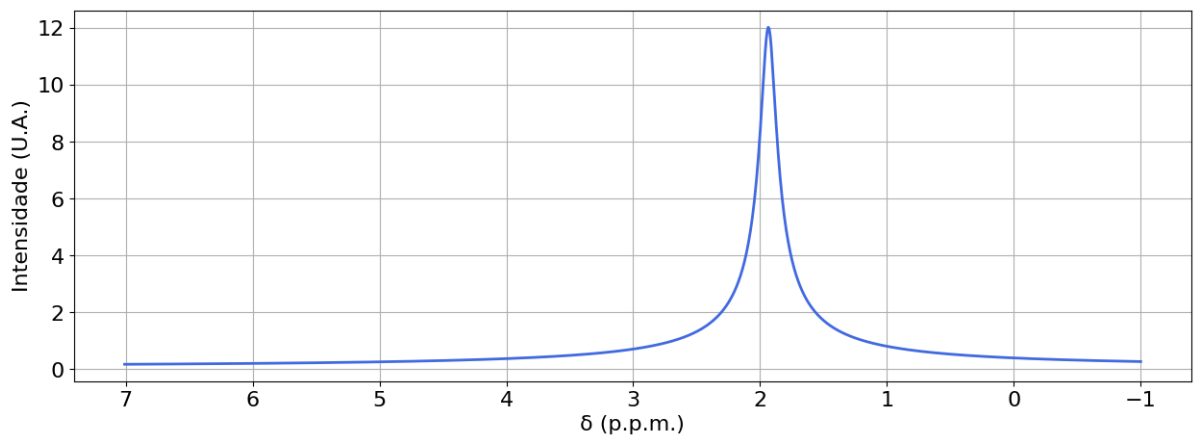


Figura 2: Sinal de controle de pico único gerado para estudo dos parâmetros resultantes.

3.4 Corrupção dos Sinais

A corrupção dos sinais foi realizada pela função *awgn*, da biblioteca *scikit-commpy*, uma biblioteca código aberto que reúne ferramentas para o estudo e simulação de sinais de comunicações. A função mencionada recebe como entrada o sinal e um valor de SNR, em dB, para o qual o sinal deve ter ao ser corrompido. A corrupção é feita com ruído gaussiano, e usa a definição de *SNR* explicada em Equação 26.

$$SNR = \frac{P_{sinal}}{P_{ruído}} \quad (26)$$

Sendo P_{sinal} e $P_{ruído}$ a potência média do sinal e a potência do ruído, respectivamente.

4 Resultados

4.1 Implementação do MPM

O algoritmo foi implementado, assim como descrito na Subseção 3.1, em etapas. Primeiro, foi testada a capacidade do mesmo de identificar exponencias decrescentes em condições ideais, a partir da implementação que não leva em conta ruído. A Figura 3

demonstra um exemplo, para o sinal descrito na Subsubseção 3.3.1, de decomposição e reconstrução do mesmo a partir da implementação que ignora a etapa que usa SVD, para L de 40%. O algoritmo parece ter obtido sucesso na identificação dos picos dos metabólitos.

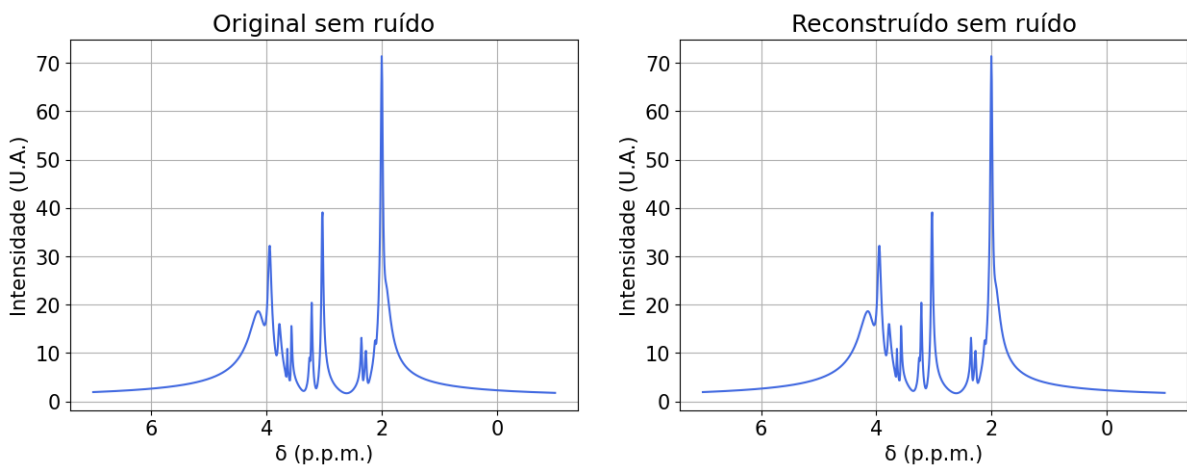


Figura 3: Sinal limpo reconstruído a partir do processo de MPM sem ruído

Realizada a etapa de filtragem em um sinal sem ruído, foi implementada então a etapa da filtragem por SVD. Para testar seu funcionamento, o sinal anteriormente usado

foi corrompido com um SNR de valor $15dB$. A Figura 4 demonstra um exemplo da decomposição e reconstrução desse sinal corrompido, para L de 40% e limite de ruído de 1^{-24} . O limite de ruído foi escolhido extremamente baixo de maneira a testar se o algoritmo continuava a funcionar após implementação da etapa de SVD.

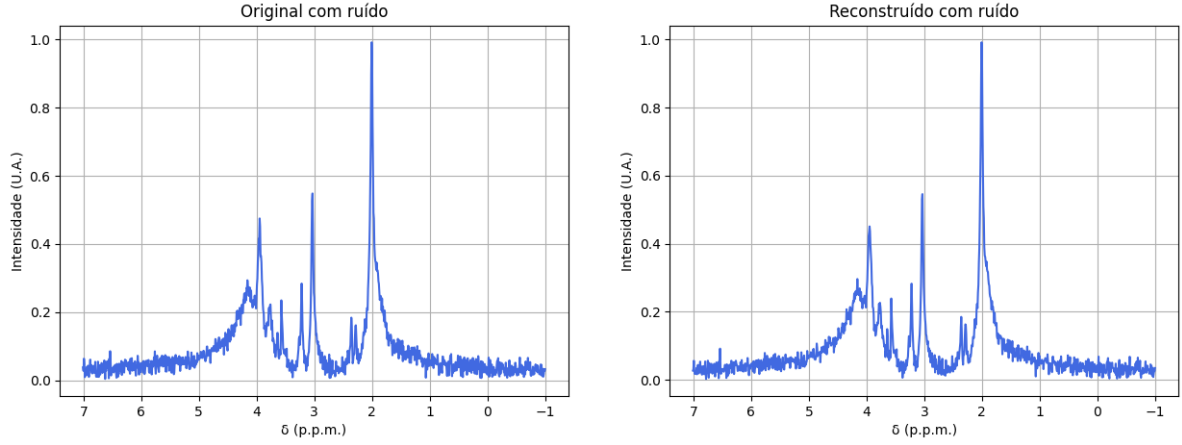


Figura 4: Sinal corrompido reconstruído a partir do processo de MPM com ruído de SNR equivalente a $15dB$

4.2 Separação de variáveis

Para testar a capacidade de cálculo das variáveis pelo programa, foi usado o sinal limpo descrito na Subsubseção 3.3.2. Esse sinal foi processado pelo MPM no domínio do tempo, e a partir dos polos e resíduos calculados, teve suas variáveis resultantes calculadas. Todas essas variáveis, por sua vez, foram ordenadas em ordem crescente a partir da amplitude S_0 .

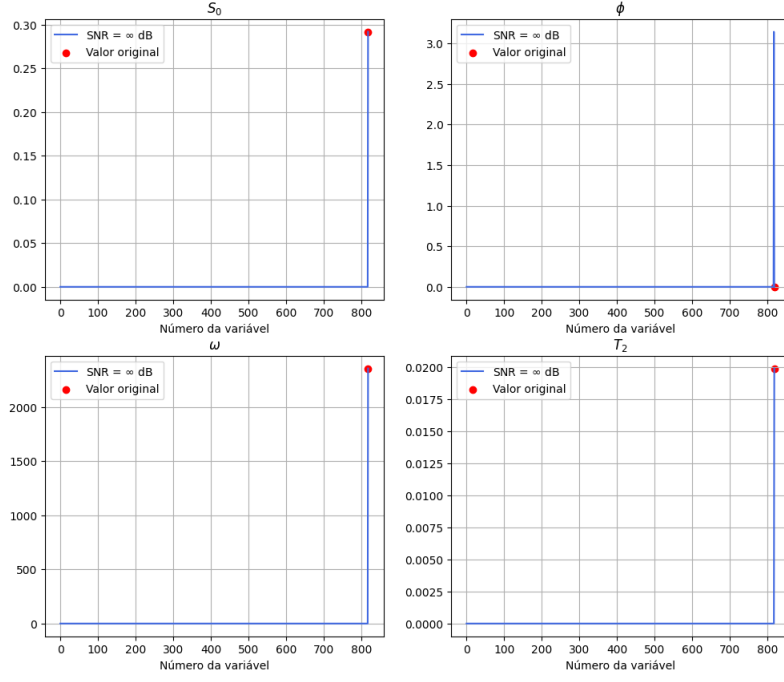


Figura 5: Valor das variáveis para o sinal limpo

Como pode ser verificado pela Figura 5, o cálculo foi realizado com sucesso, no qual todas as variáveis esperadas foram encontradas. É importante comentar que, por motivos de origem numérica, uma fase errônea de aproximadamente π foi calculada, porém na reconstrução do sinal original, essa fase multiplica uma amplitude S_0 de valor 0, fazendo-a desaparecer.

4.3 Testagem de L sem ruído.

Foi testado para o algoritmo implementado como as variáveis resultantes do processo se comportavam com relação à variação de L , no sinal anteriormente apresentado, livre de ruído. Para isso, o algoritmo foi rodado com L variando de $L_0 = 20\%$ do N a $L_N = 80\%$ do N , limites além de $N/3$ e $N/2$ previamente estabelecidos, com o objetivo de verificar se havia alguma flutuação significativa nos valores das variáveis resultantes. Para cada L , variado nesse intervalo com um passo de 5% do N foram feitas 10 médias. O parâmetro p foi fixado em 15, e a comparação foi feita por meio da Raiz do Erro Quadrático Médio (do inglês *Root-mean-squared Error*, RMSE), podendo ser conferida pela Figura 6.

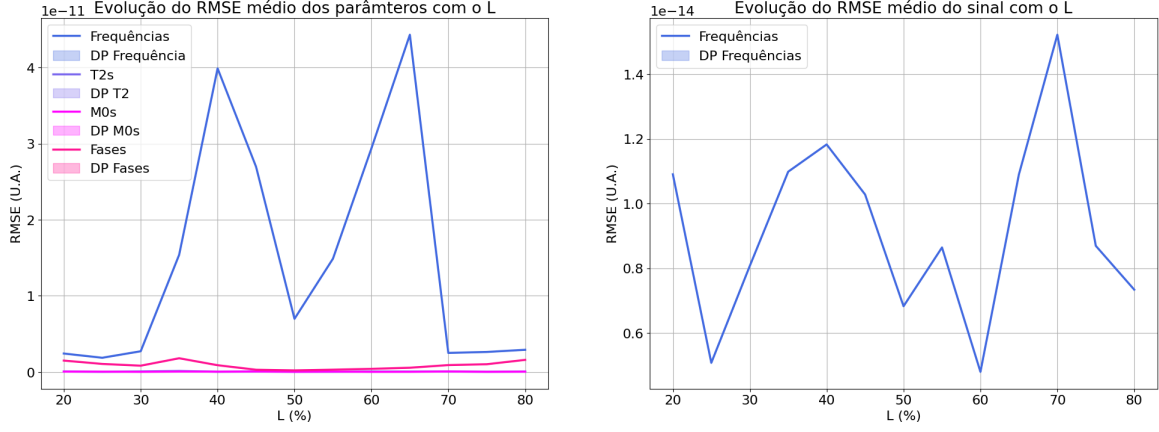


Figura 6: Resultados para a variação de L

Pela Figura 6, é possível concluir que a escolha do L parece não impactar a capacidade de cálculo das variáveis originais do sinal limpo de ruído, visto que as flutuações de valor do RMSE médio são praticamente zero.

4.4 Testagem de SVD sem ruído.

Também foi testado, para o mesmo sinal, como as variáveis resultantes se comportavam com relação ao outro parâmetro do MPM, nesse caso, a ordem da variável de corte do SVD. p foi variado entre $p_0 = 3$ e $p_N = 15$, com um passo de uma unidade, e $L = 40\%$. Para cada p , foram feitas também 10 médias.

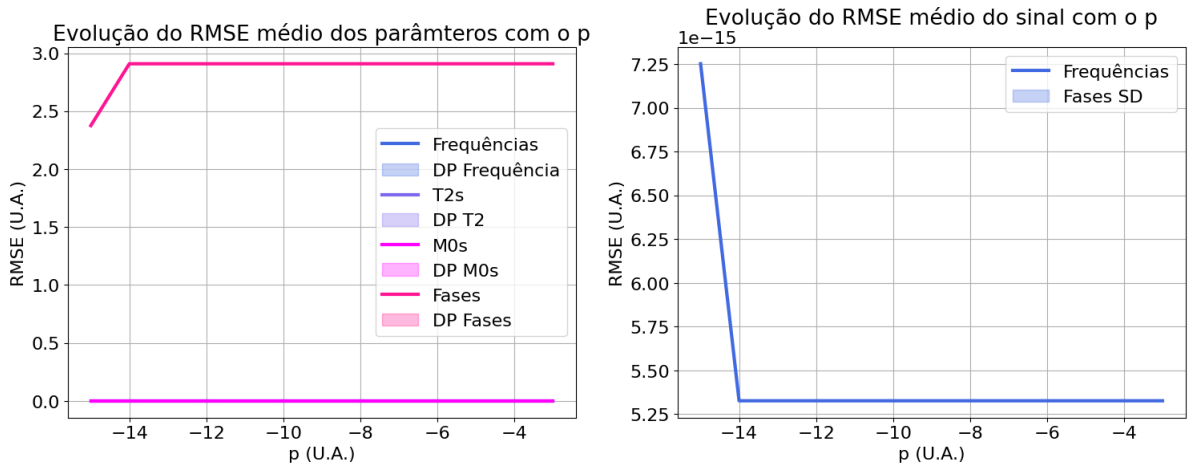


Figura 7: Resultados para a variação de p

A priori, o evidente erro com relação às fases pode chamar a atenção, visto que a fase de entrada do sinal de controle era $\phi = 0$. Constatou-se, porém, que sua origem reside em pequenos erros numéricos que se propagam na função $\arctan2$, provocando um

resultado de saída de aproximadamente 2π para fases calculadas, equivalente à fase esperada. Esclarecido esse importante detalhe, é possível concluir que, novamente para o sinal limpo, a p não demonstra nenhuma influência significativa na capacidade de cálculo das variáveis originais.

4.5 Relação entre as variáveis e o ruído

De maneira a caracterizar o comportamento da variáveis com relação ao ruído, a simulação de pico único da Subsubseção 3.3.2 foi corrompida com ruídos de diferentes níveis, variando o SNR resultante de 0.25 a 100.0.

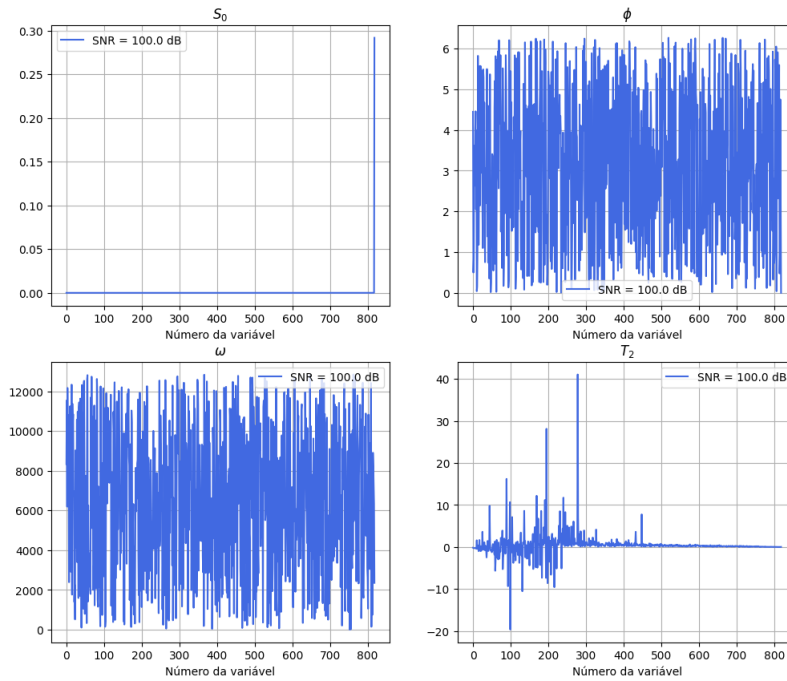


Figura 8: Valor das variáveis para o segundo SNR, de valor 100

Esse fenômeno de variáveis de valores "exóticos", presente no cálculo da fase em sinal limpo na Figura 5, se mostrou comum ao longo dos outros processos de cálculo, tornando necessária a sua análise no contexto do algoritmo. Como pode ser verificado pela Figura 8, para um valor de SNR mais baixo, nesse caso 100, o cálculo das frequência, tempos de decaimento e das fases demonstrou o mesmo comportamento anteriormente descrito, com valores oscilando de maneira ruidosa e pouco previsível, e amplitudes significativas. Assim como descrito no caso de SNR infinito, a priori esse fenômeno pode se apresentar como obstáculo à capacidade de cálculo do MPM, porém novamente, quando analisada sob o contexto das outras variáveis, a maioria dos valores, quando multiplicados pela amplitude

S_0 , se anula.

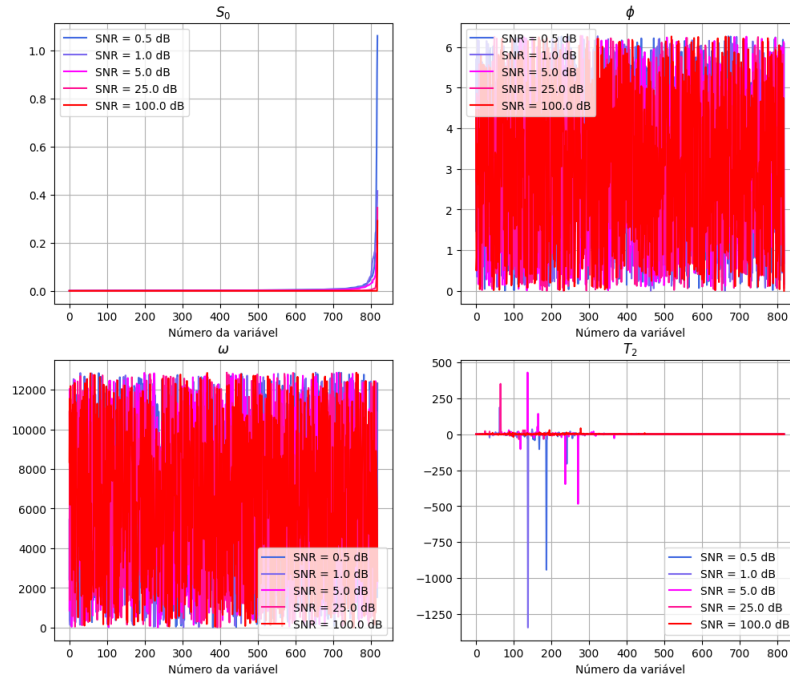


Figura 9: Valor das variáveis para o segundo SNR, de valor 100

A variável S_0 aqui se mostra dominante para a construção do sinal final. Como verificado pela Figura 9, conforme o SNR decresce, partindo da ordenação crescente de amplitudes, a distribuição de valores de S_0 não nulos aumenta. Esse aumento tanto em quantidade quanto em amplitude confere ao sinal final uma quantidade maior de frequências aparentemente aleatórias, compondo assim o ruído característico da corrupção originalmente aplicada.

4.6 Relação entre pico e ruído

5 Conclusão

Referências

- [1] J.F. Hauer, C.J. Demeure, and L.L. Scharf. Initial results in prony analysis of power system response signals. *IEEE Transactions on Power Systems*, 5(1):80–89, 1990.

- [2] T.K. Sarkar and O. Pereira. Using the matrix pencil method to estimate the parameters of a sum of complex exponentials. *IEEE Antennas and Propagation Magazine*, 37(1):48–55, 1995.