

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"
2. Implementação do MPM sem ruído
3. Implementação do MPM com ruído
4. Separação de variáveis (s0, phi, omega, T2)
5. Testagem do L sem ruído
6. Testagem do SVD sem ruído
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 Grantmatcher [?] 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.

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

3 Métodos

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 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.

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

3.2 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 crit rios do usu rio, para o qual valores abaixo ou igual ao valor limite eram truncados. Al m disso, para as fun  es externas, foi necess rio se atentar ao seus par metros pr prios de filtro, usados em etapas intermedi rias de c lculos que utilizam o SVD. Nesse  ltimo caso, foi definido como filtro de corte o valor de 10^{-7} .

3.3 Separa  o de vari veis

Com o intuito de melhorar o controle e entendimento dos par metros calculados pelo MPM, foi feita uma correspond ncia entre os polos z_i e res duos R_i com os par metros originais que comp  e o sinal, nesse caso, $S_{0,i}$, ϕ_i , ω_i e $T_{2,i}$. Considerando que um sinal de Espectroscopia por Resson ncia Magn tica (do ingl s *Magnetic Resonance Spectroscopy*, MRS) pode ser representado pela Equa  o 22, sua vers o discreta pode ser escrita assumindo $t = kT_s$, sendo T_s o per odo de *sampling* do sinal, e k um inteiro representando o passo, como na Equa  o 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 aproxima  o feita por meio da Equa  o 21   uma representa  o suficientemente correta do sinal,   poss vel estabelecer uma equival ncia entre os par metros originais e calculados, a partir da Equa  o 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 equival ncia demonstra que enquanto os polos z_i representam $e^{j\omega_i T_s} e^{-\frac{T_s}{T_2}}$, os res duos representam a multiplica  o $S_{0,i} e^{j\phi_i}$. Considerando a representa  o polar de um n mero complexo, na Equa  o 25,   poss vel visualizar uma maneira simples de c lculo dos par metros originais a partir de z_i e R_i , concluindo que $e^{-\frac{T_s}{T_2}}$ corresponde ao m dulo de z , $\omega_i T_s$ ao argumento de z , $S_{0,i}$ ao m dulo de R , e ϕ_i ao argumento de R . A Tabela 1 re ne as equival ncias resultantes.

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

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.

3.4 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. O sinal, gerado com um campo de $B_0 = 3T$, começa em $t_0 = 0.0$ s e termina $t_n = 1.0$ s, com um passo de $dt \approx 0.0005$ 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.

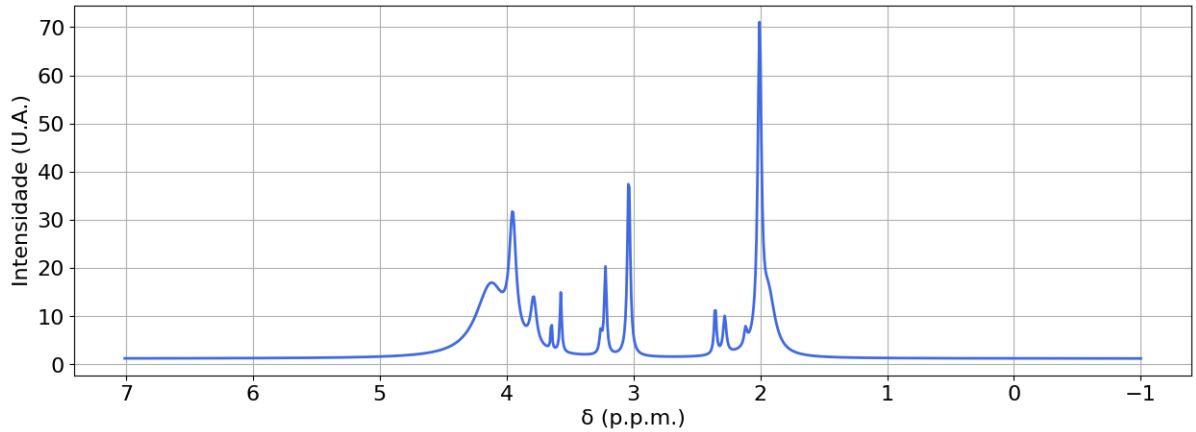


Figura 1: Sinal de controle gerado para caracterização das variáveis.

3.5 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.

3.6 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. Para cada p , foram feitas também 10 médias.

3.7 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, no caso o N-Acetylaspartato, ou NAA. 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 Subseção 3.4, podendo ser conferida pela Figura 2.

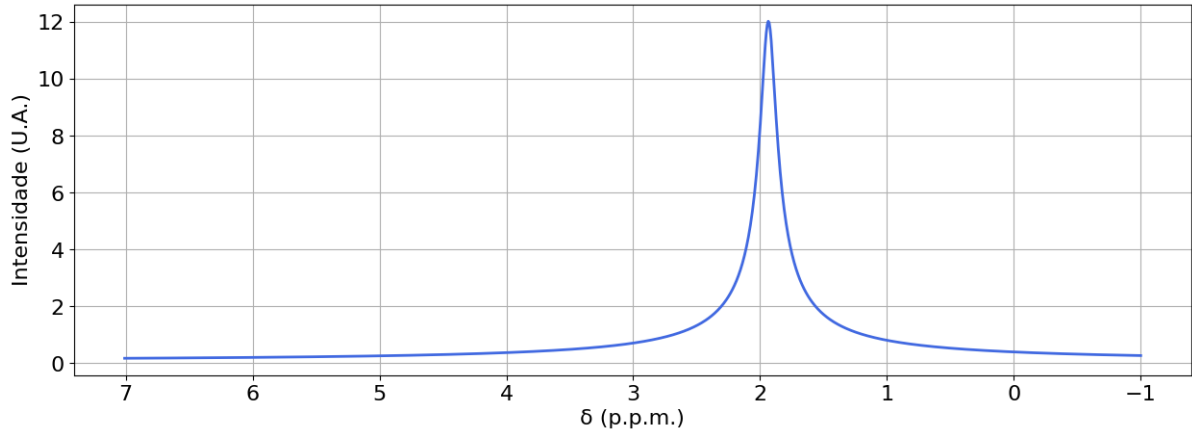


Figura 2: Sinal de controle de pico único gerado para estudo dos parâmetros resultantes.

4 Resultados

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.