

# Controle de qualidade automatizado em espectroscopia por ressonância magnética através da rede neural ART Fuzzy e algoritmo k-means

Gabriel Dias , Thays Abreu , Simone Appenzeller , Sergio Dertkigil , Letícia Rittner

{g172441@dac.unicamp.br, thays@unicamp.br, appenzel@unicamp.br, sergiosj@unicamp.br, lrittner@unicamp.br}

Departamento de Engenharia de Computação e Automação (DCA)  
Faculdade de Engenharia Elétrica e de Computação (FEEC)  
Universidade Estadual de Campinas (Unicamp)  
Campinas, SP, Brasil

**Resumo** – A Espectroscopia por Ressonância Magnética (ERM), frequentemente, produz espectros com ruído e artefatos que podem induzir erros de quantificação ou interpretação que impactam o uso clínico dos dados espectroscópicos. Neste trabalho foi proposto um modelo de clusterização para controle de qualidade em ERM usando a rede neural ART Fuzzy e o algoritmo k-Means. Utilizaram-se 22048 espectros de aquisições multivoxel provenientes do Hospital de Clínicas da Unicamp. O método proposto utiliza uma abordagem hierárquica: primeiro, a rede neural ART Fuzzy busca clusterizar espectros que apresentam grande variação para filtrar sinais válidos. A partir deste cluster, faz-se uma nova clusterização usando k-means de forma a obter padrões de boa qualidade. Foram realizadas comparações quantitativas dos clusters obtidos com métricas tradicionais usadas para avaliar a qualidade dos espectros mostraram que, aproximadamente, 93% atendem ao critério métrico SNR, 85% ao critério FWHM, 100% ao CRLB e 81% considerando os três critérios simultaneamente.

**Palavras-chave** – Espectroscopia por ressonância magnética, Controle de qualidade, Aprendizado de máquina, Rede neural ART fuzzy, k-means

## 1. Introdução

A Espectroscopia por Ressonância Magnética (ERM) viabiliza a identificação e quantificação de neurometabólitos para monitorar alterações metabólicas cerebrais de forma não invasiva. Essas informações podem dar suporte ao diagnóstico e tratamento de condições neurológicas tais como epilepsia, Alzheimer e tumores no cérebro [9]. No entanto, os espectros, sinais no domínio da frequência produzidos pela ERM, costumam ser gerados com artefatos que podem induzir erros de quantificação ou interpretação, reduzindo o valor clínico da técnica. Alguns dos fatores que comprometem a qualidade do espectro são correntes parasitas, baixa supressão da influência da água, contaminação lipídica e volume parcial [3]. Quando não cientes desses fenômenos, médicos podem facilmente tirar conclusões incorretas de mapas metabólicos de baixa qualidade, pois os softwares tradicionais de quantificação tais como LCMoel [13], TARQUIN [14] e Osprey [10] não verificam a qualidade dos espectros a serem analisados de forma automatizada. Ao mesmo tempo, a inspeção manual é afetada pela subjetividade humana e muito demorada para o método de aquisição multivoxel [11].

Existem métricas (medidas de qualidade), tais como Relação Sinal Ruído (SNR - do inglês *Signal to Noise Ratio*), Largura a meia altura (FWHM - do inglês *Full Width at Half Maximum*) e limite inferior de Cramér-Rao (CRBL - do inglês *Cramér Rao Lower Bound*) que são

utilizadas para controle de qualidade de espectro [12]. No entanto, essas métricas precisam de valores limiares para definir se um espectro é ruidoso ou não, sendo que não há um consenso entre os especialistas sobre esses valores e eles podem variar de acordo com a aplicação [6].

Abordagens que usam aprendizado de máquina devem desempenhar um papel cada vez mais importante na criação de métodos automatizados rápidos e confiáveis para ERM [6]. Até o momento, existem poucos trabalhos para controle de qualidade em ERM [11, 2, 4, 7].

Dentre os trabalhos mais promissores na identificação de espectros de boa qualidade, Pedrosa de Barros et al. [11] utilizou um algoritmo supervisionado baseado em floresta aleatória que obteve uma área abaixo da curva (AUC - do inglês *Area Under the Curve*) de 0.976. Utilizou-se um conjunto de 9756 dados multivoxel rotulados por especialistas que foram submetidos a um processo de engenharia de atributos. Extraíram-se atributos do sinal no domínio do tempo e da frequência. Alguns deles foram derivados diretamente dos dados brutos, como a magnitude de um dado ponto ou de métricas estatísticas como média, desvio padrão, curtose e distorção. O modelo foi implementado em um módulo de extensão do software tradicional JMRUI [8], mas é necessário que seja investigada sua aplicação para scanners e formas de aquisição que não foram utilizados pelos autores no estudo.

Gurbani et al. [2] propôs um modelo supervisionado

através de uma arquitetura de rede neural convolucional profunda. Foram utilizados um conjunto de 8894 espectros adquiridos pela metodologia multivoxel que foram rotulados por especialistas. A rede pôde ser treinada sem engenharia de atributos, apenas com os pontos da curva espectral. Atingiu-se uma AUC de 0.951 com a modelagem, que também precisa ser avaliada em outros contextos de aquisição, afim de que seja analisada sua capacidade de generalização.

## 2. Proposta

O trabalho aqui apresentado propôs, pela primeira vez, um método hierárquico baseado em dois modelos não-supervisionados para a tratativa do controle de qualidade de ERM. Diferentemente de outras propostas que utilizaram engenharia de atributos para modelagem [7, 4, 11], este trabalho empregou apenas os pontos da curva espectral. Também, a modelagem aqui apresentada destaca-se pela quantidade de 22048 espectros disponíveis para estudo, uma quantidade consideravelmente maior do que em outros trabalhos [2, 11].

O método foi baseado na rede neural artificial ART Fuzzy [1] e o algoritmo k-means [5]. A rede neural ART Fuzzy pertence à família de redes ART (do inglês *Adaptive Resonance Theory*), possui treinamento não supervisionado e engloba em sua arquitetura cálculos baseados na lógica nebulosa, tendo como principais características a estabilidade e a plasticidade. O algoritmo k-means é um algoritmo numérico não supervisionado, não determinístico e iterativo de clusterização, sendo amplamente utilizado em diversos problemas devido a sua eficácia, simplicidade e rapidez.

### 2.1. Conjunto de Dados

O conjunto de dados foi composto por 106 aquisições multivoxel na região do corpo caloso de voluntários saudáveis e pacientes do Hospital de Clínicas (HC - UNICAMP). O protocolo da aquisição incluiu: imagens ponderadas em T1; Sequência de pulso 2D (PRESS); ângulo de excitação de 90°; TE longo: 144ms e TR: 2000ms e as varreduras foram realizadas com um scanner Philips 3T. Cada aquisição foi constituída por uma malha de espectros de 16 linhas por 13 colunas, totalizando 22048 espectros utilizados nesse estudo. Todos os participantes do estudo assinaram o Termo de Consentimento Livre e Esclarecido (TCLE).

### 2.2. Pré-Processamento

Os espectros advindos do scanner constituem uma curva com 1024 pontos. Para a modelagem, foi selecionada a região de frequência com os principais neurometabólitos

que são quantificados [15], resultando em espectros com 330 pontos (Fig. 1). Utilizou-se a normalização Min-Max [16] destes dados.

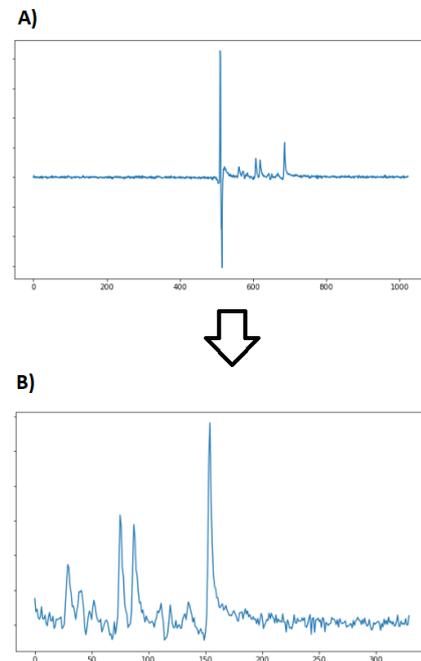


Figura 1. Em (A) espectro bruto com 1024 pontos. (B) região metabólica selecionada com 330 pontos.

### 2.3. Treinamento

O método hierárquico proposto é composto de 2 etapas: a clusterização pela rede neural ART Fuzzy, para descartar espectros de baixo sinal; e a clusterização dos espectros selecionados na primeira etapa, buscando encontrar o cluster com espectros de boa qualidade (Fig.2).

Para a calibração do modelo ART Fuzzy, o parâmetro de escolha ( $\alpha$ ) foi sempre fixado no valor de 0.0001. Variou-se a quantidade de épocas, parâmetro de vigilância ( $\rho$ ) e parâmetro de treinamento ( $\beta$ ) para ser feita a validação do modelo em diversos casos. Aplicou-se uma varredura baseada em *Grid Search* para os parâmetros de vigilância e de treinamento, de 0.3 à 0.9 com um passo de 0.5, e para a quantidade de épocas, de 1 até 10. Para uma quantidade de épocas igual a 6,  $\alpha = 0.0001$ ,  $\rho = 0.7$  e  $\beta = 0.7$ , obteve-se a clusterização desejada (Fig. 3).

Em seguida, a partir do grupo separado pela rede neural ART Fuzzy (Fig. 3A), fez-se uma nova clusterização usando o algoritmo k-means de forma a obter um grupo de espectros que apresentasse padrões de boa qualidade. Apenas altos valores do número de classes k geraram grupos com distinções significativas. Atingiu-se o resultado almejado para um valor de  $k = 15$  (Fig. 4).

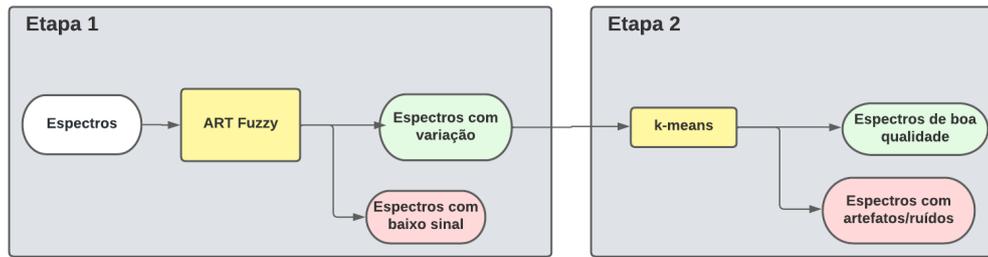


Figura 2. Fluxograma da abordagem hierárquica proposta. Na primeira Etapa, a rede neural ART Fuzzy busca clusterizar espectros que apresentam variação para que os espectros de baixo sinal sejam desconsiderados. Em seguida, encaminha-se para a segunda Etapa com uma nova clusterização usando k-means de forma a obter um grupo com padrões de boa qualidade.

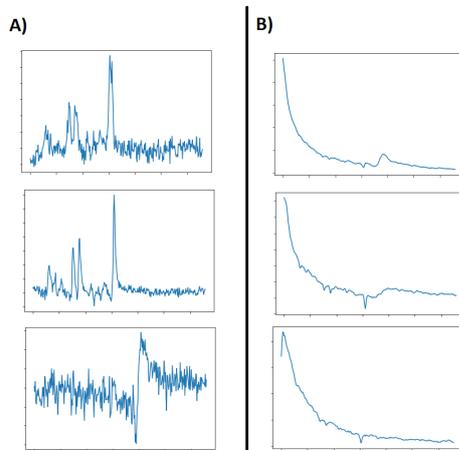


Figura 3. Resultado da clusterização por ART Fuzzy: (A) exemplos de espectros que pertencem ao grupo considerado de interesse para a próxima etapa do método; (B) exemplos com pouca variação tidos como espectros de baixo sinal.

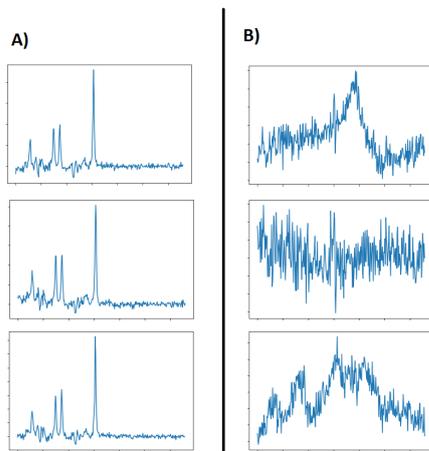


Figura 4. Clusterização obtida após k-means: (A) exemplos de espectros que pertencem ao grupo de boa qualidade desejado; (B) exemplos de espectros ruidosos e com artefatos que foram clusterizados nos demais grupos.

### 3. Resultados

Os agrupamentos finais obtidos pelo método foram avaliados qualitativamente (Fig. 5). Comparações quantitativas com métricas tradicionais usadas para avaliar a qualidade dos espectros de ERM também foram conduzidas. Para essa análise, utilizaram-se os espectros classificados como de boa qualidade pelo modelo. Os valores típicos de limiar utilizado para as métricas tradicionais são:  $SNR > 10$ ;  $FWHM < 10$ ;  $CRLB < 50$  [12]. Aproximadamente, 93% dos espectros contemplaram os critérios métricos SNR, 85% para o FWHM, 100% para o CRLB e 81% considerando os três critérios simultaneamente.

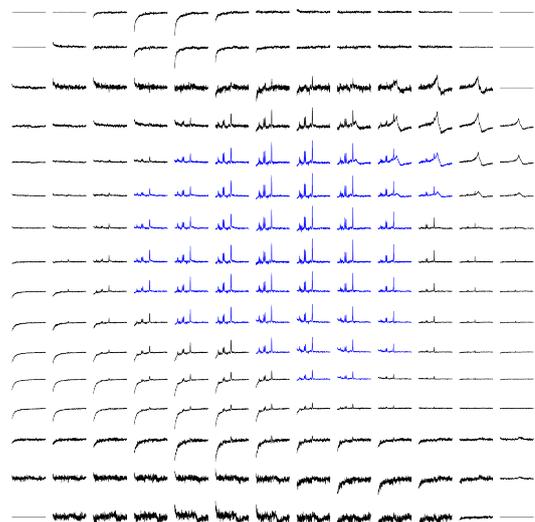


Figura 5. Clusterização resultante em uma grade espectral multivoxel de um determinado paciente: espectros tidos como de boa qualidade pelo modelo final (em azul); espectros considerados ruidosos ou com artefato (em preto)

### 4. Conclusões

O modelo proposto foi capaz de encontrar padrões de boa qualidade nos espectros obtidos a partir de aquisições multivoxel. Trata-se de um modelo rápido, facil-

mente implementável e consistente com as métricas tradicionais de qualidade usadas. Em trabalhos futuros, serão investigados outros protocolos de aquisição multivoxel para os dados espectroscópicos. Também, outras técnicas de aprendizado de máquina serão exploradas com análises sobre os espectros considerados corrompidos cujos artefatos poderiam ser corrigidos por meio de técnicas existentes. Dessa forma, o método proposto por esse projeto de pesquisa instiga a obtenção de uma ferramenta automatizada e consistente para atuar no controle de qualidade de ERM, garantindo maior valor clínico para a técnica.

## Agradecimentos

Gabriel Dias agradece ao Scholarship Program da DeepMind ([deepmind.com/scholarships](https://deepmind.com/scholarships)) pela bolsa de estudos concedida que possibilita dedicação integral ao programa de pós-graduação. Thays Abreu agradece à bolsa CAPES.

## Referências

- [1] Gail A Carpenter, Stephen Grossberg, and David B Rosen. Fuzzy art: Fast stable learning and categorization of analog patterns by an adaptive resonance system. *Neural Networks*, 4(6):759–771, 1991.
- [2] Saumya S Gurbani, Eduard Schreibmann, Andrew A Maudsley, James Scott Cordova, Brian J Soher, Harish Poptani, Gaurav Verma, Peter B Barker, Hyunsuk Shim, and Lee AD Cooper. A convolutional neural network to filter artifacts in spectroscopic mri. *Magnetic Resonance in Medicine*, 80(5):1765–1775, 2018.
- [3] Roland Kreis. Issues of spectral quality in clinical 1h-magnetic resonance spectroscopy and a gallery of artifacts. *NMR in Biomedicine*, 17(6):361–381, 2004.
- [4] Sreenath P Kyathanahally, Victor Mocioiu, Nuno Pedrosa de Barros, Johannes Slotboom, Alan J Wright, Margarida Julià-Sapé, Carles Arús, and Roland Kreis. Quality of clinical brain tumor mr spectra judged by humans and machine learning tools. *Magnetic Resonance in Medicine*, 79(5):2500–2510, 2018.
- [5] J MacQueen. Classification and analysis of multivariate observations. In *5th Berkeley Symp. Math. Statist. Probability*, pages 281–297, 1967.
- [6] Andrew A Maudsley, Ovidiu C Andronesi, Peter B Barker, Alberto Bizzi, Wolfgang Bogner, Anke Henning, Sarah J Nelson, Stefan Posse, Dikoma C Shungu, and Brian J Soher. Advanced magnetic resonance spectroscopic neuroimaging: Experts' consensus recommendations. *NMR in Biomedicine*, 34(5):e4309, 2021.
- [7] Bjoern H Menze, B Michael Kelm, Marc-André Weber, Peter Bachert, and Fred A Hamprecht. Mimicking the human expert: pattern recognition for an automated assessment of data quality in mr spectroscopic images. *Magnetic Resonance in Medicine: An Official Journal of the International Society for Magnetic Resonance in Medicine*, 59(6):1457–1466, 2008.
- [8] A Naressi, Chantal Couturier, I Castang, R De Beer, and Danielle Graveron-Demilly. Java-based graphical user interface for mrui, a software package for quantitation of in vivo/medical magnetic resonance spectroscopy signals. *Computers in Biology and Medicine*, 31(4):269–286, 2001.
- [9] Sarah J Nelson. Multivoxel magnetic resonance spectroscopy of brain tumors. *Molecular Cancer Therapeutics*, 2(5):497–507, 2003.
- [10] Georg Oeltzschner, Helge J Zöllner, Steve CN Hui, Mark Mikkelsen, Muhammad G Saleh, Sofie Tapper, and Richard AE Edden. Osprey: Open-source processing, reconstruction & estimation of magnetic resonance spectroscopy data. *Journal of Neuroscience Methods*, 343:108827, 2020.
- [11] Nuno Pedrosa de Barros, Richard McKinley, Urs-peter Knecht, Roland Wiest, and Johannes Slotboom. Automatic quality control in clinical 1h mrsi of brain cancer. *NMR in Biomedicine*, 29(5):563–575, 2016.
- [12] Danilo Pereira, Larissa Ganaha, Simone Appenzeller, and Leticia Rittner. Open-source toolbox for analysis and spectra quality control of magnetic resonance spectroscopic imaging. In *Medical Imaging 2021: Biomedical Applications in Molecular, Structural, and Functional Imaging*, volume 11600, pages 64–71. SPIE, 2021.
- [13] Stephen W Provencher. Estimation of metabolite concentrations from localized in vivo proton nmr spectra. *Magnetic Resonance in Medicine*, 30(6):672–679, 1993.
- [14] Greg Reynolds, Martin Wilson, Andrew Peet, and Theodoros N Arvanitis. An algorithm for the automated quantitation of metabolites in in vitro nmr signals. *Magnetic Resonance in Medicine: An Official Journal of the International Society for Magnetic Resonance in Medicine*, 56(6):1211–1219, 2006.
- [15] Mohamed Saber and Frank Gaillard. MR spectroscopy, May 2008.
- [16] Wikipedia. Feature scaling. [http://en.wikipedia.org/wiki/Feature\\_scaling](http://en.wikipedia.org/wiki/Feature_scaling), 2013. Online; accessed 17 August 2022.