

Rumo a um Modelo de Fundação para a Espectroscopia por Ressonância Magnética

Wesna Simone B. Araujo
w225843@dac.unicamp.br

Letícia Rittner
lrittner@unicamp.br

Departamento de Engenharia de Computação e Automação (DCA)
Faculdade de Engenharia Elétrica e de Computação (FEEC)
Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP)

Resumo

O presente trabalho apresenta os passos iniciais em direção à construção do primeiro modelo de fundação especializado em dados de Espectroscopia por Ressonância Magnética (MRS) que possibilite seu amplo uso em diversas tarefas na área de MRS, como reconstrução de espectros, quantificação de metabólitos e predição de diagnósticos. O principal objetivo é expandir o uso e os estudos em MRS através da disponibilidade de um modelo base. Assim, especialmente para estudos de pequenos casos, não haverá mais a necessidade de se utilizar grandes quantidades de dados, visto que o conhecimento fundamental já estará incorporado nos pesos do modelo pré-treinado. Experimentos demonstraram que o conhecimento aprendido durante o pré-treinamento foi satisfatoriamente transferido e adaptado para uma nova tarefa, cujo propósito era identificar diferentes scanners (Philips, Siemens e GE) através dos espectros MRS. A taxa de acerto foi de 83%.

Keywords — Espectroscopia por Ressonância Magnética, Aprendizado Profundo, Modelo Vision Transformer, Espectrogramas.

1. Introdução

Espectroscopia por Ressonância Magnética (MRS, do inglês *Magnetic Resonance Spectroscopy*) é uma técnica não invasiva que permite a quantificação de metabólitos para estudos de suas distribuições em diferentes regiões do corpo [6]. A Figura 1 ilustra um típico espectro de MRS. Essa técnica pode auxiliar em diagnósticos e tratamentos de doenças, como tumores cerebrais e Alzheimer [3, 7]. Contudo, MRS ainda é pouco utilizado clinicamente devido a necessidade de várias etapas de processamento de sinal e longo tempo de aquisição [1, 10, 8, 9], o que traz desconforto para o paciente. Adicionalmente, pequenos grupos de pesquisa enfrentam desafios ao estudar condições específicas, como consequência da limitada disponibilidade de datasets de MRS públicos.

Recentemente, modelos de aprendizado profundo (DL, do inglês *deep learning*) aplicados em MRS vêm

se destacando pela contribuição no melhoramento da qualidade dos dados [11, 2] através da substituição dos espectros no domínio da frequência (Figura 2 - superior) pelos seus correspondentes espectrogramas (Figura 2 - inferior), que nada mais são do que uma representação visual da variação do espectro ao longo do tempo. Além disso, considerando que modelos DL requerem uma quantidade razoável de dados para alcançar uma boa performance, dados simulados são usados para complementar a quantidade de dados *in vivo*.

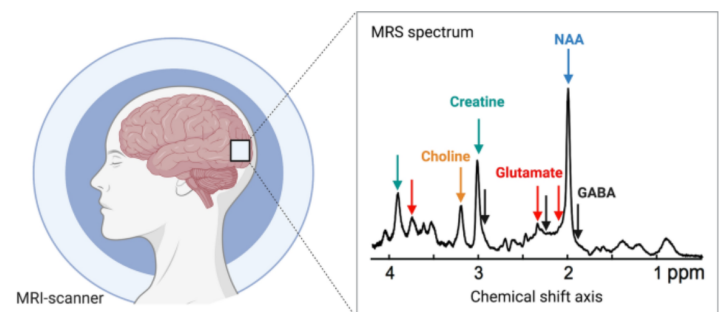


Figura 1: Espectro de MRS extraído de uma região do cérebro de interesse. As setas coloridas indicam a localização de alguns metabólitos. Adaptada de [5].

Dessa forma, esse estudo propõe o desenvolvimento de um modelo de fundação (FM, do inglês *Foundation Model*) pré-treinado em espectrogramas de MRS gerados tanto de dados simulados quanto de dados *in vivo*. Espera-se que o modelo pré-treinado aprenda as principais características gerais de sinais MRS de modo que seu conhecimento (peso do modelo) possa ser facilmente compartilhado e adaptado (*fine-tuning*) para qualquer tarefa no campo de espectroscopia (classificação, reconstrução, quantificação) usando apenas pequenos conjuntos de dados.

2. Métodos

Nosso modelo de fundação foi pré-treinado tanto em dados *in vivo* quanto em dados simulados, sendo menos de 1% do total (150 mil amostras) de dados *in vivo*. Os dados *in vivo* foram coletados de um dataset

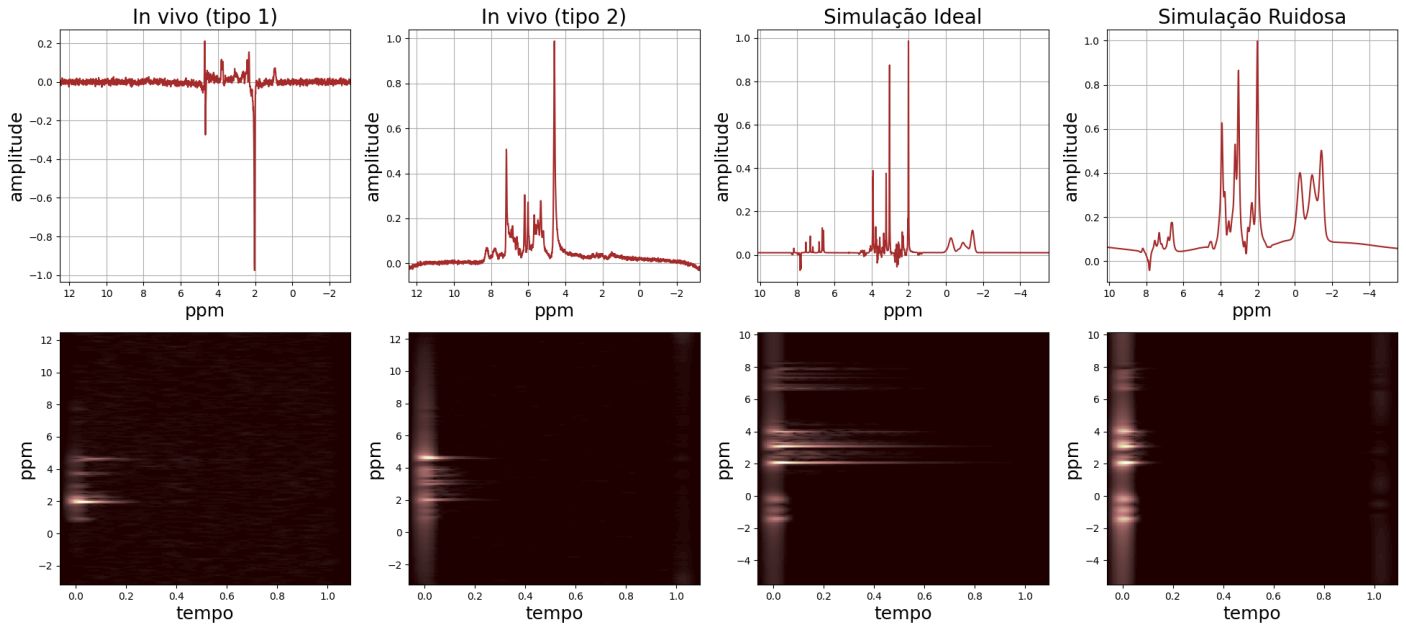


Figura 2: Amostras dos datasets utilizados com dois exemplos de dados *in vivo* e dois exemplos de simulação do tipo *in vivo* 2 (com e sem adição de ruído). Os espectros são mostrados na linha superior e seus respectivos espectrogramas na linha inferior.

público e de um dataset privado.

Nós adotamos como arquitetura um autoencoder mascarado [4] que é composto por um encoder e um decoder ambos do tipo ViT (do inglês, *Vision Transformer*) (Figura 3 - esquerda). O encoder é responsável por aprender as principais características da entrada, enquanto que o decoder a reconstrói de acordo com o aprendizado do encoder. O modelo recebe os espectrogramas parcialmente mascarados (Figura 4 - coluna do meio) e aprende a reconstruir as partes mascaradas conhecendo apenas as partes não mascaradas. Essa abordagem ajuda o modelo a aprender as características mais importantes da entrada baseado no contexto e não apenas em informações vizinhas. Uma vez que o modelo é treinado, o decoder pode ser descartado, e apenas o encoder é utilizado para a aplicação em uma tarefa de interesse (Figura 3 - direita).

Assim, para avaliar as representações aprendidas, o encoder pré-treinado foi adaptado para uma tarefa de classificação entre diferentes máquinas de aquisição do sinal de MRS (Philips, GE e Siemens) usando um pequeno conjunto de dados, com um pouco mais de 100 amostras.

3. Impactos da Pesquisa

A técnica MRS, além de ser não invasiva, também serve como complemento para as clássicas técnicas de Imagem por Ressonância Magnética. Isso acontece

porque, para a identificação de algumas enfermidades, a informação anatômica não é suficiente; é também necessário analisar informações metabólicas, como é o caso da distinção de tipos de tumores e do entendimento dos mecanismos da epilepsia.

No entanto, essa técnica ainda é pouco explorada tanto em pesquisa quanto clinicamente, devido ao alto tempo e custo de aquisição e à complexidade de processamento e análise do sinal.

Assim, a existência de um modelo de fundação de MRS abre caminho para estudos de grande relevância sem a necessidade da aquisição de mais do que algumas dezenas de espectros. Como exemplo, pode-se citar a possibilidade de se investigar por que determinados pacientes com epilepsia conseguem controlar suas crises com medicamentos, enquanto outros necessitam ser submetidos à cirurgia. Ou ainda, identificar o grau de um tumor (nível de agressividade) sem o uso de procedimentos invasivos, como biópsias. Uma vez consolidado academicamente, isso contribuiria para o aumento do interesse pelo uso de MRS nos hospitais.

4. Resultados e Discussão

Em relação à tarefa de reconstrução, que foi utilizada para treinar o modelo, a Figura 4 qualitativamente mostra o resultado do treinamento (terceira coluna) tanto para um dado *in vivo* (linha superior) quanto para um dado simulado (linha inferior).

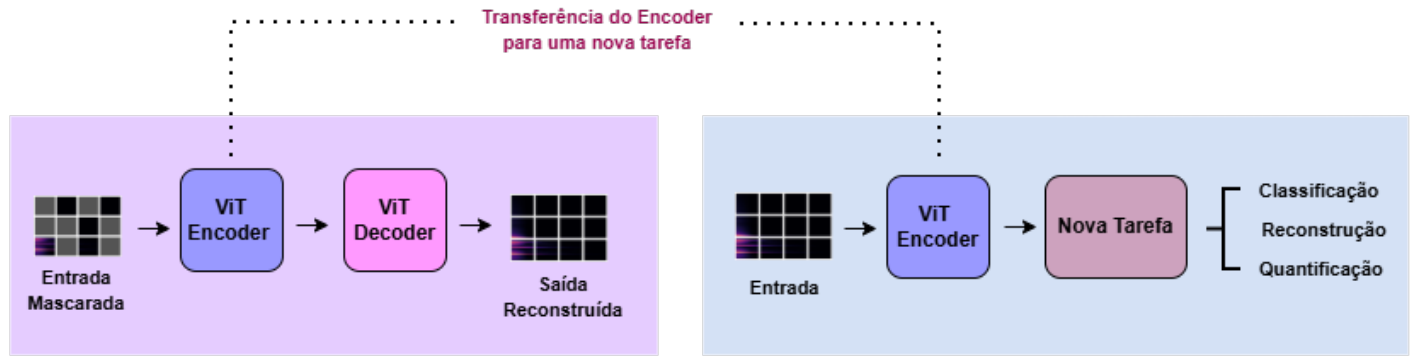


Figura 3: Arquitetura do modelo de fundação. O bloco à esquerda (fundo roxo) representa a primeira etapa de treinamento de um modelo de fundação, enquanto que o bloco à direita (fundo azul) mostra o uso do encoder da primeira parte para a adaptação para uma outra tarefa qualquer.

Nota-se que o FM treinado em dados MRS foi capaz de reconstruir em detalhes tanto os dados *in vivo* quanto os simulados, demonstrando que o modelo adquiriu domínio das características dos dados MRS durante o treinamento.

A avaliação da performance de adaptabilidade do modelo foi testada transferindo o conhecimento adquirido pelo encoder para uma tarefa de interesse, nesse caso, a classificação entre fornecedores. A nova arquitetura, apesar do pequeno conjunto de treino e da sutil diferença entre os *scanners* [5], foi capaz de corretamente classificar 83% do conjunto de teste. Isso demonstra a flexibilidade do FM pré-treinando em dados MRS e a falta da necessidade de grandes datasets para o estudo de determinado problema.

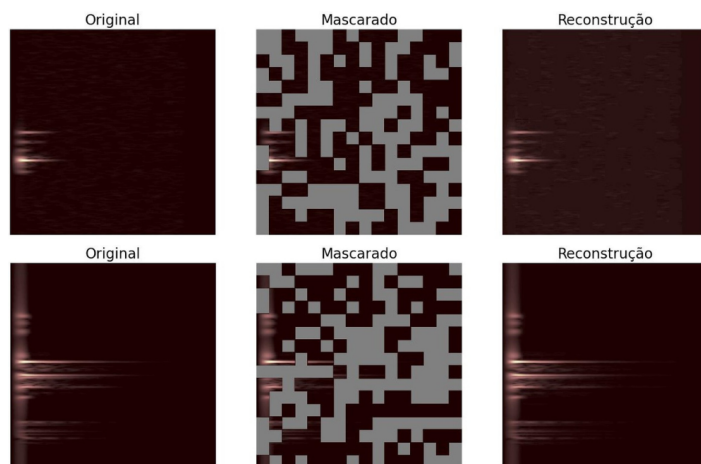


Figura 4: Exemplos de reconstrução pelo modelo de fundação: de um dado *in vivo* do tipo 1 (linha superior); dado simulado (linha inferior). Entrada original (esquerda); entrada mascarada (centro); entrada reconstruída (direita).

5. Conclusão

Esse estudo apresenta um passo inicial em direção à construção de um modelo de fundação para espectroscopia de ressonância magnética que contribuirá para avanços nas pesquisas de MRS e, por consequência, no aumento das aplicações clínicas. O objetivo do melhoramento dessa abordagem é facilitar o compartilhamento de dados privados através dos pesos do modelo, permitindo que esse conhecimento seja usado e adaptado para qualquer tarefa de MRS utilizando uma quantidade de dados simbólica. Trabalhos futuros expandirão os datasets *in vivo* e melhorarão as capacidades de generalização do modelo através de colaborações com outros pesquisadores.

Agradecimentos

Esse estudo foi financiado pela CAPES - Código Financeiro 001e pelo CNPq (#317133/2023-3).

Referências

- [1] R. A. De Graaf. *In vivo NMR spectroscopy: principles and techniques*. John Wiley & Sons, 2007.
- [2] G. Dias, R. P. Berto, M. Oliveira, L. Ueda, S. Dertkigil, P. D. Costa, A. Shamaei, H. Bugler, R. Souza, A. Harris, et al. Spectro-vit: A vision transformer model for gaba-edited mega-press reconstruction using spectrograms. *Magnetic Resonance Imaging*, 113:110219, 2024.
- [3] R. Faghihi, B. Zeinali-Rafsanjani, M.-A. Mosleh-Shirazi, M. Saeedi-Moghadam, M. Lotfi, R. Jalli, and V. Irvani. Magnetic resonance spectroscopy and its clinical applications: a review. *Journal of medical imaging and radiation sciences*, 48(3):233–253, 2017.

- [4] K. He, X. Chen, S. Xie, Y. Li, P. Dollár, and R. Girshick. Masked autoencoders are scalable vision learners. In *Proceedings of the IEEE/CVF conference on computer vision and pattern recognition*, pages 16000–16009, 2022.
- [5] I. B. Ip and H. Bridge. Investigating the neurochemistry of the human visual system using magnetic resonance spectroscopy. *Brain Structure and Function*, 227(4):1491–1505, 2022.
- [6] A. Monir. Brain m.r.spectroscopy: A brief basic guide. Topics in Radiology series, 2005.
- [7] C. E. Mountford, P. Stanwell, A. Lin, S. Ramadan, and B. Ross. Neurospectroscopy: the past, present and future. *Chemical reviews*, 110(5):3060–3086, 2010.
- [8] P. G. Mullins, D. J. McGonigle, R. L. O’Gorman, N. A. Puts, R. Vidyasagar, C. J. Evans, R. A. Edden, et al. Current practice in the use of megapress spectroscopy for the detection of gaba. *Neuroimage*, 86:43–52, 2014.
- [9] G. Oeltzschner, M. G. Saleh, D. Rimbault, M. Mikkelsen, K. L. Chan, N. A. Puts, and R. A. Edden. Advanced hadamard-encoded editing of seven low-concentration brain metabolites: Principles of hercules. *Neuroimage*, 185:181–190, 2019.
- [10] A. Peek, T. Rebbeck, A. Leaver, S. L. Foster, K. Refshauge, N. Puts, G. Oeltzschner, O. C. Andronesi, P. B. Barker, W. Bogner, et al. A comprehensive guide to mega-pess for gaba measurement. *Analytical biochemistry*, 669:115113, 2023.
- [11] D. M. van de Sande, J. P. Merkofer, S. Amirrajab, M. Veta, R. J. van Sloun, M. J. Versluis, J. F. Jansen, J. S. van den Brink, and M. Breeuwer. A review of machine learning applications for the proton mr spectroscopy workflow. *Magnetic Resonance in Medicine*, 90(4):1253–1270, 2023.