

# Program pro zpracování spektroskopických dat z magnetické rezonanční spektroskopie

Dominik Havlíček

## Abstrakt

Prohlížeč spekter je program, který slouží k základnímu zpracování, zobrazení a analýze MR dat. Podporovaným formátem je formát, kterým kóduje informace o proběhlém skenu společnost Bruker. Program je napsán ve vývojovém prostředí MATLAB

Klíčová slova: MATLAB, magnetická rezonance, spektroskopie, Fourierova transformace

## 1. Úvod

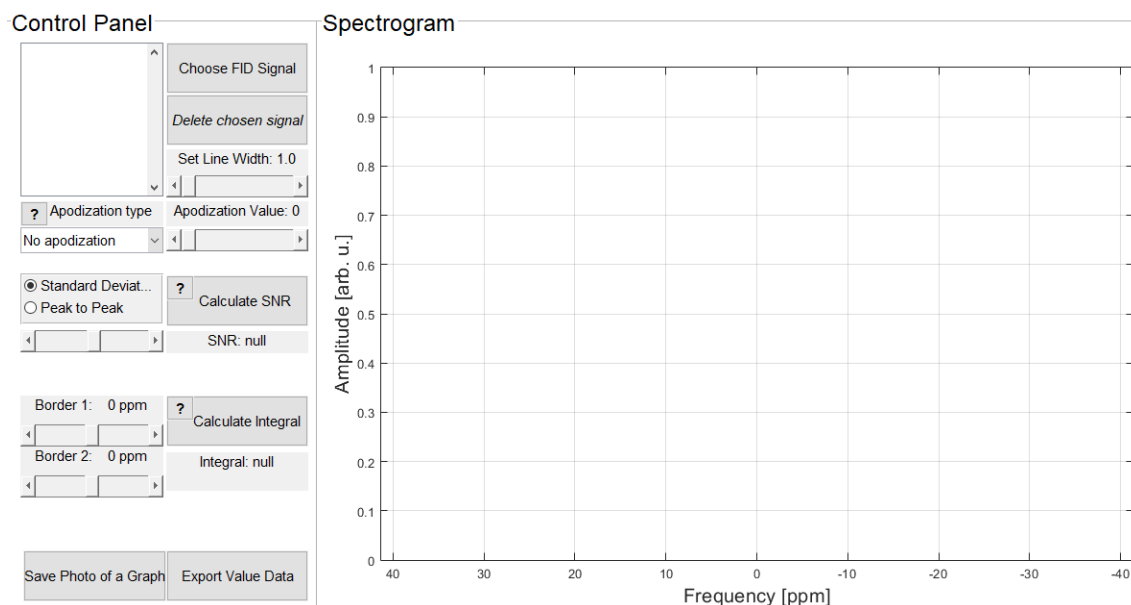
Zobrazování magnetickou rezonancí (MRI) i magnetická rezonanční spektroskopie (MRS) jsou neinvazivní diagnostické metody založené na principu měření indukovaného signálu z excitovaných atomových jader. Zatímco MRI poskytuje anatomickou informaci zkoumaného objektu, MRS udává biochemické složení ve vyšetřované oblasti. Obě metody se neustále vyvíjejí, čímž dochází ke zrychlování a zpřesňování diagnostiky.

## 2. Program

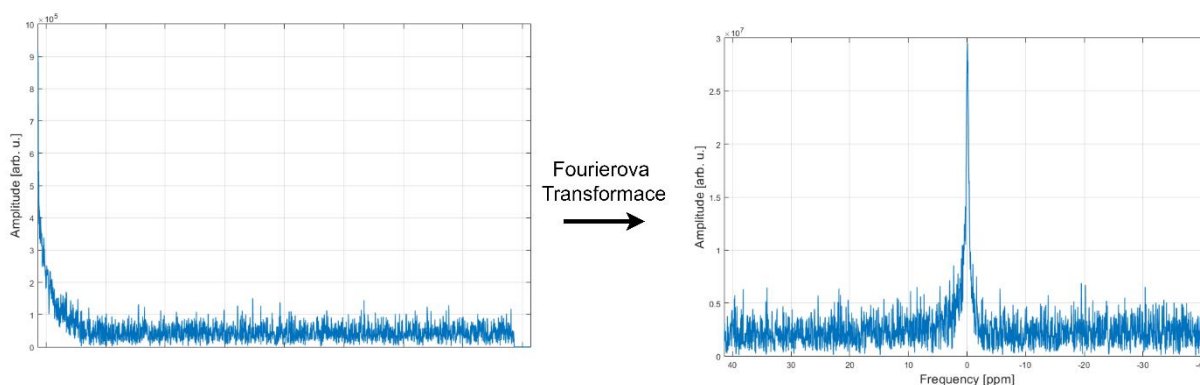
Program, který slouží k analýze spektroskopických dat z magnetické rezonanční spektroskopie, byl vytvořen ve vývojovém prostředí MATLAB. Program je kompatibilní s verzí R2007b a novější. V současné době je možné provádět analýzu na datech, které jsou formátovány dle standardu společnosti Bruker, což je společnost, která je mimo jiné výrobcem MR tomografů. Program je tvořen třemi jednotlivými soubory, přičemž k otevření slouží soubor `main.m`. Poté stačí postupovat pouze podle pokynů na obrazovce. Po spuštění skriptu se uživateli otevře grafické uživatelské rozhraní, zkráceně GUI, z anglického Graphic User Interface. V tomto prostředí se nachází uvítací obrazovka s žádostí pro uživatele o vyplnění parametru týkajícího se tzv. zero-fillingu. Zlepšení rozlišení spektra můžeme dosáhnout prodloužením akviziční doby, po proběhlém měření můžeme akviziční dobu prodloužit přidáním vzorků. Jelikož jsme již ovšem využili všechny vzorky nesoucí informaci o signálu, využíváme přidání vzorků o nulové informační hodnotě, odtud pochází výraz zero-filling neboli vyplnění nulami. Zvyšováním takovýchto vzorků může nastat, že se nepatrně sníží hodnota poměru signálu a šumu (SNR), protože jsme nabyli více informací o nulové informační hodnotě, přičemž hodnotné informace o signálu zůstaly neměnné (Graff, 2019). Po vyplnění vstupního parametru se uživateli otevře druhé uživatelské okno, ve kterém probíhá samotná analýza dat.

### 3. Možnosti programu

Po vyplnění vstupního parametru se uživateli otevře druhé uživatelské okno, ve kterém probíhá samotná analýza dat. Toto grafické rozhraní je tvořeno dvěma panely. První tzv. ovládací panel, ve kterém probíhá manipulace s načteným signálem. Druhý, ve kterém se tento zpracovaný signál zobrazí. Po aplikování Fourierovy transformace na vstupní signál FID vzniká spektrum tohoto výchozího FID signálu (viz Obr. 2)



Obr. 1 GUI po vyplnění vstupního parametru



Obr. 2 Aplikování Fourierovy transformace na výchozí signál FID

#### 3.1 Apodizace

Kromě zero-fillingu, je také možné použít metodu apodizace, jakožto nástroj pro vylepšení rozlišení a vlastností NMR spektra. Během apodizace dochází ke konvoluci FID signálu  $f(t)$  s funkcí filtru  $f_{filtr}(t)$ , které mají typicky exponenciální průběh. Apodizace se využívá pro potlačení šumu krajních částí signálu, přičemž taktéž dochází k částečnému potlačení hledaného signálu (McRobbie et al., 2007). Vytvořený program nabízí čtyři filtrovací funkce, s následujícími funkčními předpisy, taktéž jsou znázorněny jejich průběhy na Obr. 3.

- Lorentzova funkce

$$w = e^{(-\pi a \cdot x)} \quad (1)$$

- Gaussova funkce

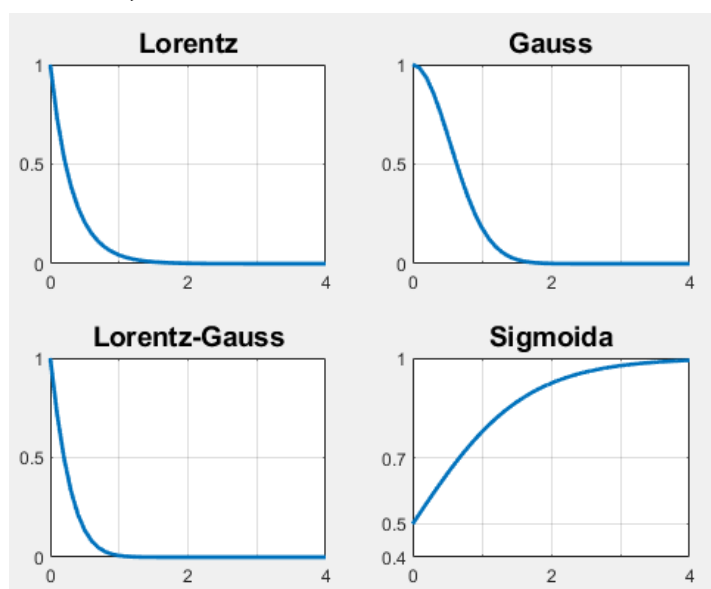
$$w = e^{-x^2 \cdot \left(\frac{\pi a}{2 \cdot \sqrt{\log(2)}}\right)^2} \quad (2)$$

- Lorentz-Gaussovská funkce

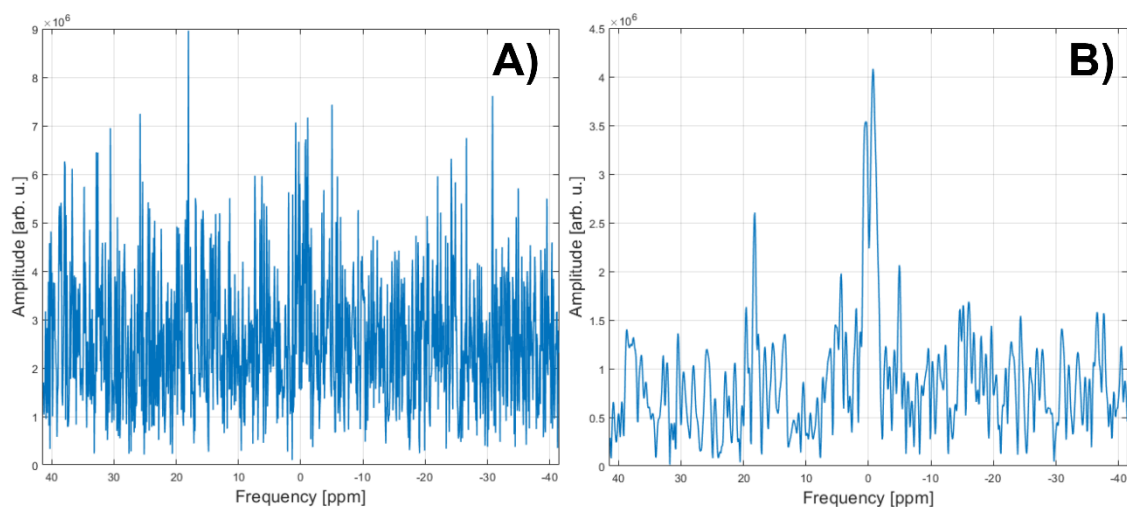
$$w = e^{-\left(\pi a \cdot x + \left(\frac{\pi a}{2 \cdot \sqrt{\log(2)}}\right)^2 \cdot x^2\right)} \quad (3)$$

- Sigmoida

$$w = \frac{1}{(1 + e^{0,05 \cdot (x-a)})} \quad (4)$$



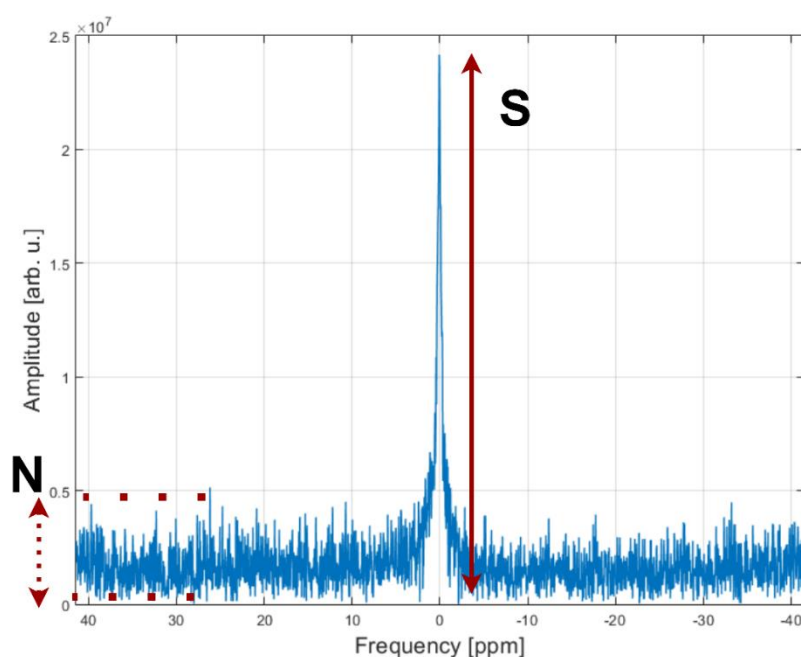
Obr. 3 Aplikované apodizační funkce



Obr. 4 A) Neapodizované spektrum, B) Apodizované spektrum

### 3.2 Poměr signál šum (SNR)

SNR je jedna z nejužitečnějších metrik, které popisují systém. Při MR spektroskopii se nejčastěji udává jako poměr amplitudy signálu  $S$  a amplitudy šumu  $N$ . Je tedy nezbytné, aby byla hodnota  $SNR > 1$ . Ovšem v některých zdrojích (např. Li, Regal a Gonen, 2001) se hodnota šumu neudává jako amplituda šumu, ale jako směrodatná odchylka šumu.



Obr. 5 Veličiny při výpočtu hodnoty SNR (šum – amplituda šumu)

### 3.3 Koncentrace metabolitu

Koncentrace metabolitu souvisí s integrálem signálu neboli plochou, která se nachází pod spektrální křivkou námi vybraného signálu. Hodnota koncentrace je úměrná počtu jader, které podléhají jevu magnetické rezonance během měření ve vybrané oblasti a produkují tedy signál. Zde je důležité si uvědomit, že se nejedná pouze o maximální amplitudu signálu, ale o plochu, která se pod vrcholem nachází. Program dává uživateli možnost si zvolit oblast, z které bude plochu pod křivkou zjišťovat. Je doporučeno plochu počítat v pološířce signálu, zkráceně značeno jako FWHM z anglického Full Width at Half Maximum.

### 3.4 Export dat

Po dokončení analýzy máme možnost výsledná data exportovat. Jedna z nabídek je vytvoření snímku spektrogramu a jeho následné uložení v námi vybraném grafickém formátu a volbě umístění souboru. Druhou možností je uložení významných proměnných v textovém či tabulkovém formátu.

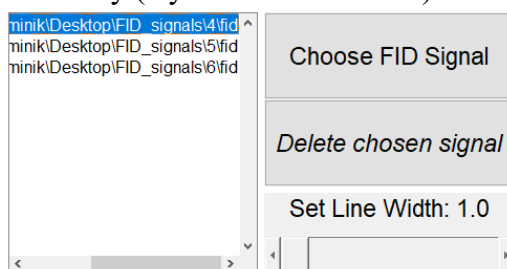
#### 4. Metodický manuál k doporučenému použití programu

- **Choose FID signal** – tlačítko, které využíváme pokaždé jako první, po kliknutí se otevře dialogové okno, které slouží k výběru souboru *fid* (Obr. 6), který se nachází ve složce s měřením. Správně načtený signál se následně zobrazí ve výběrovém seznamu v levém horním rohu, kde se zobrazí cesta k tomuto souboru. Takových *fid* souborů můžeme vložit libovolný počet

|              |                 |                |       |
|--------------|-----------------|----------------|-------|
| pdata        | 7.4.2021 19:09  | Složka souborů |       |
| acqp         | 19.3.2021 11:42 | Soubor         | 10 kB |
| acq          | 19.3.2021 11:42 | Soubor         | 4 kB  |
| acqus        | 19.3.2021 11:42 | Soubor         | 4 kB  |
| fid          | 19.3.2021 11:42 | Soubor         | 16 kB |
| method       | 19.3.2021 11:42 | Soubor         | 5 kB  |
| pulseprogram | 19.3.2021 11:42 | Soubor         | 20 kB |
| spnam0       | 19.3.2021 11:42 | Soubor         | 1 kB  |
| spnam1       | 19.3.2021 11:42 | Soubor         | 1 kB  |
| uxnmr.par    | 19.3.2021 11:42 | Soubor PAR     | 40 kB |

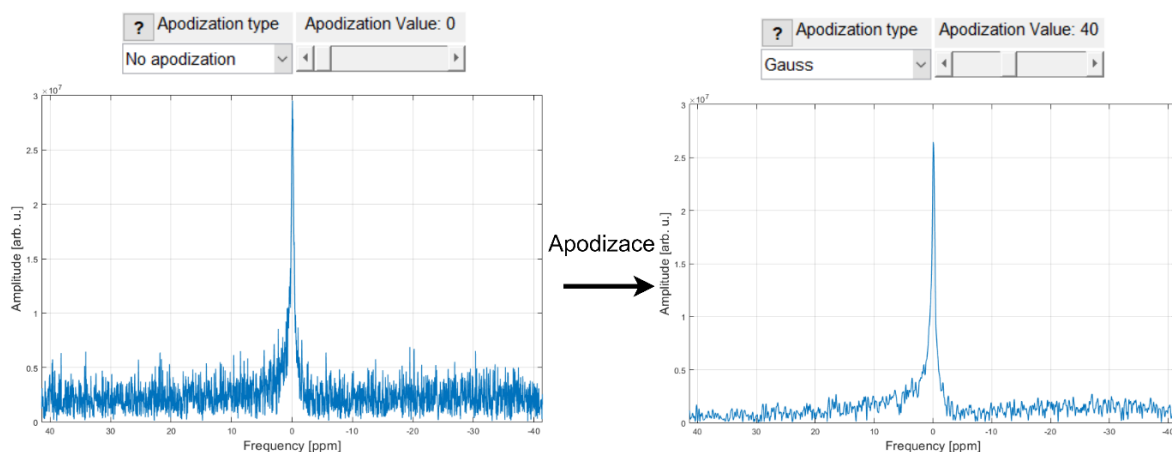
Obr. 6 Složka s měřením, obsahující veškeré informace o proběhlém skenu

- **Delete chosen signal** – po kliknutí na toto funkční tlačítko dojde k odebrání aktivního signálu z výběrového seznamu, respektive z vyhodnocování. Aktivním se signál stane poté co klikneme na cestu k souboru tohoto signálu, který se zobrazuje ve výběrovém seznamu (modrý podkres, viz Obr. 7).
- **Set Line Width** – pomocí posuvníku si můžeme nastavit šířku čáry spektra až na pětinasobek výchozí hodnoty (Výchozí hodnota: 1.0)



Obr. 7 Detail na skupinu funkčních tlačítek

- **Apodization type** – výběr filtrovací, apodizační funkce z rozbalovacího seznamu
- **Posuvník Apodization Value** – nastavení míry apodizace

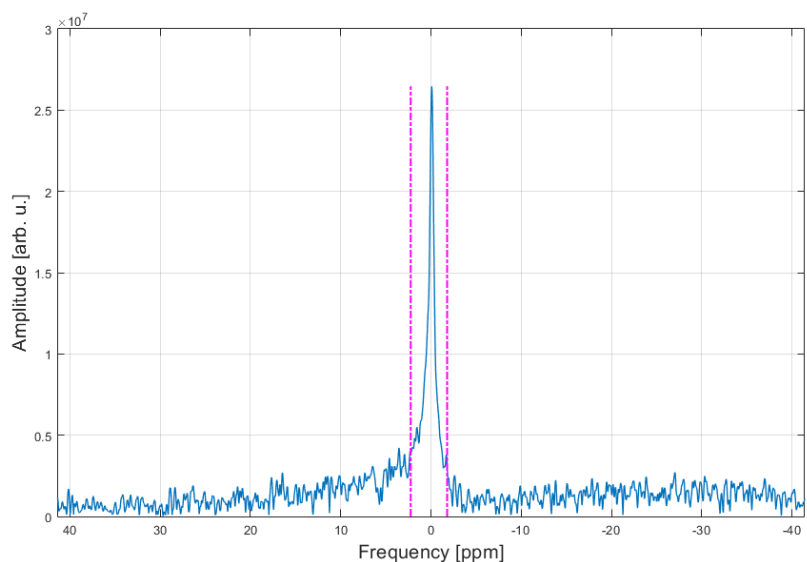


Obr. 8 Vliv apodizace na spektrum

- **Standard Deviation a Peak to Peak přepínač** – zde si vybíráme, zda hodnota šumu bude brána jako amplituda šumu (Peak to Peak) nebo jako směrodatná odchylka šumu (Standard Deviation).

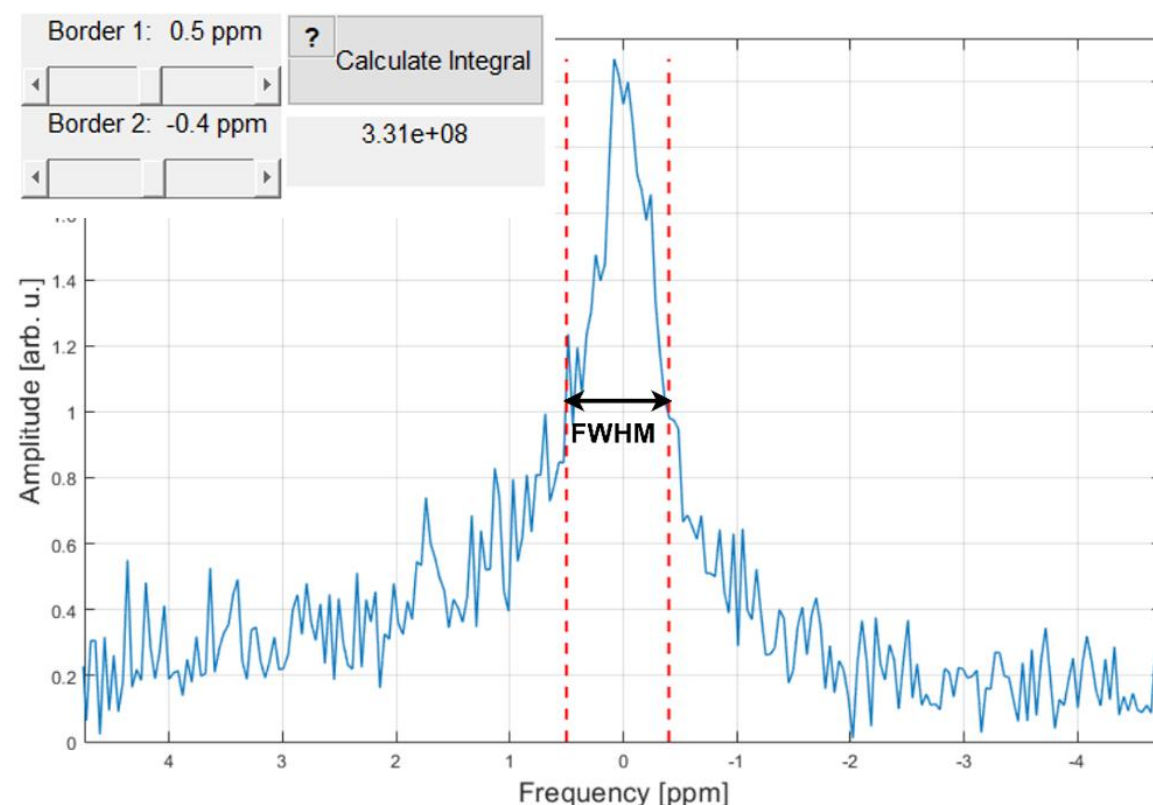
*Pozn. Směrodatná odchylka bude vždy nižší hodnota než amplituda šumu, z toho vyplývá vyšší hodnoty SNR pro tuto možnost.*

- Posuvník, který se nachází pod přepínačem, využíváme k lokalizaci námi sledovaného vrcholu, píku. Rozsah je znázorněn růžovou čerchovanou čarou (Obr. 9).
- **Calculate SNR** – výpočet hodnoty SNR na základě nastavené hodnoty šumu a lokalizovaného vrcholu



Obr. 9 Lokalizace píku při výpočtu SNR

- *Pozn. Podobně jako při výpočtu SNR využíváme posuvníku i při výpočtu plochy pod křivkou. Využíváme dvou posuvníků, které říkají odkud kam se má integrál spočítat*
- **Posuvník Border 1 a posuvník Border 2** – ohraničení spektra, odkud kam se integrál počítá (znázorněno červenou přerušovanou čarou, viz Obr. 10)
- **Calculate Integral** – po nastavení hranic integrálu, klepneme na toto tlačítko a hodnota integrálu se poté zobrazí v textovém okně pod tímto tlačítkem



Obr. 10 Ohraničení a výpočet integrálu

- **Save Photo of a Graph** – uložení celého panelu Spektrogramu v námi vybraném grafickém formátu
- **Export Value Data** – export dat výsledného spektra, na výběr máme tabulkové formáty (.xlsx, .csv) nebo textový formát (.txt). Exportované parametry jsou – cesta k souboru načteného spektra, typ a parametr apodizace, amplituda signálu, hodnota integrálu, hranice, z kterých byl integrál spočten, hodnota SNR a zda šum se je spočten jako amplituda šumu či ze směrodatné odchylky šumu.

```

<----- Information about this spectra ----->
File Name: 1. C:\Users\          \FID_signals\6\fid
Creation of this File: 21/03/03-11:50

<----- Apodization ----->
Apodization Type: Gauss
Apodization Parameter: 40

<----- Amplitude ----->
Signal Amplitude: 1.130154e+08

<----- Integral ----->
Integral Value: 1.73e+09
1st Integral Border: -0.84811
2nd Integral Border: 1.6362

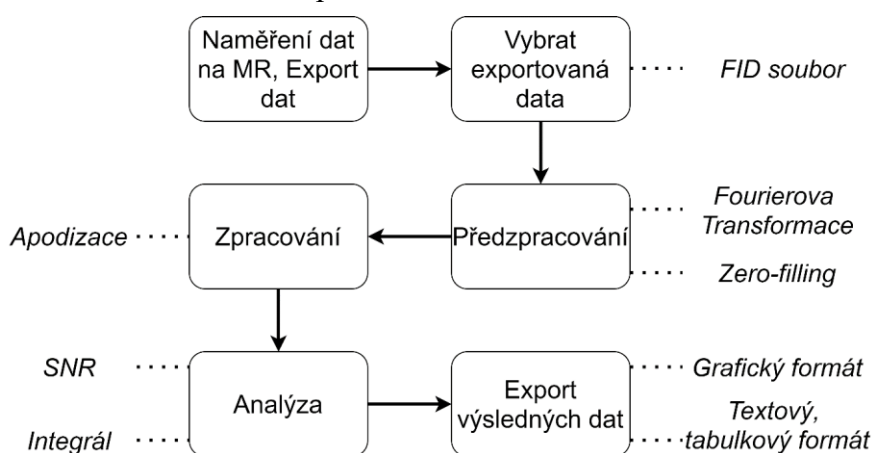
<----- SNR ----->
SNR Value: 10.12
Noise Type: Peak to Peak

```

Obr. 11 Exportovaná data v textovém formátu

|   | A                     | B                               |
|---|-----------------------|---------------------------------|
| 1 | File Name             | 1, C:\Users\ \FID_signals\6\fid |
| 2 | Apodization Type      | Gauss                           |
| 3 | Apodization Parameter | 40,00                           |
| 4 | Signal Amplitude      | 113015448,85                    |
| 5 | Integral Value        | 1730000000,00                   |
| 6 | 1st Integral Border   | -0,85                           |
| 7 | 2nd Integral Border   | 1,16                            |
| 8 | SNR Value             | 10,12                           |
| 9 | NoiseType             | Peak to Peak                    |

Obr. 12 Exportovaná data v tabulkovém formátu



Obr. 13 Zjednodušený proces algoritmizace celého procesu

## Závěr

Tento prohlížeč spekter si kladl především za cíl vytvoření nástroje, který napomůže rychlé a intuitivní analýze MR spekter.

## Literatura

- GRAFF, A. Robin. 2019. *In Vivo NMR Spectroscopy: Principles and Techniques*. 3rd ed. New Jersey: Wiley. DOI 10.1002/9781119382461.
- LI B.S.Y., J. REGAL a O. GONEN. 2001. SNR Versus Resolution in 3D <sup>1</sup>H MRS of the Human Brain at High Magnetic Fields. *Magnetic Resonance in Medicine*. **46**(6), 1049-1053. DOI 10.1002/mrm.1297.
- MCROBBIE, W. Donald et al. 2007. *MRI from Picture to Proton*. 2nd ed. Cambridge: Cambridge University Press. ISBN 978-0521683845.