

# Transformada inversa de Laplace em relaxometria por RMN: uma perspectiva sobre seleção de parâmetros

Gustavo Solcia<sup>1</sup> Elton Tadeu Montrazi<sup>2</sup> Tito José Bonagamba<sup>1</sup> Fernando Fernandes Paiva<sup>1</sup>

Vol 3, 2022 - 154758

Concorrentes ao Prêmio e Pôster

Download

## Resumo

Distribuições dos tempos de relaxação longitudinal e transversal podem ser utilizadas para determinar a distribuição de poros em materiais porosos. [1] Aplica-se a transformada inversa de Laplace, usualmente utilizando a regularização de Tikhonov, para obter distribuições de tempos de relaxação através do processamento de dados de relaxometria. Entretanto, a regularização Tikhonov gera um problema de determinação de parâmetro [2] ao lidar com o sinal multiexponencial intrínseco de sequências como a Carr-Purcell-Meiboom-Gill (CPMG). O objetivo deste trabalho é de melhorar o critério para a seleção de parâmetros e propor uma nova perspectiva sobre a análise da transformada inversa de Laplace. Simulamos distribuições log-Gaussianas de dois e três picos baseadas em distribuições de meios porosos em forma de um sinal de CPMG. Para que os sinais fossem representativos, eles possuíam uma relação sinal-ruído de 5, 10, 20, 30 e 50 em 500 realizações de ruído. A seleção de parâmetros foi feita baseada em um algoritmo denominado curva-L, [3] mas avaliamos intervalos de parâmetros de regularização simétricos e assimétricos ao redor da escolha feita pelo método. Assim, consideramos distribuições médias resultantes de múltiplos parâmetros que foram comparadas com as distribuições log-Gaussianas originais por uma métrica de similaridade. Os resultados mostraram que devido à subestimação da escolha de parâmetros dada pela curva-L, utilizar intervalos assimétricos resultava em distribuições mais similares com a original. Portanto, apresentamos uma nova perspectiva de se selecionar um intervalo de parâmetros devido ao conhecimento do viés de seleção e as flutuações provenientes de uma distribuição de regularização calculada por um único parâmetro.

## Referências:

- [1] Song, Y.Q., Journal of Magnetic Resonance, 2013, 229, 12-24.
- [2] Zou, Y.L., Xie, R.H., Arad, A., Petroleum Science, 2016, 13, 237-246.
- [3] Hansen, P.C., O'Leary D.P., SIAM Journal on Scientific Computing, 1993, 14, 1487-1503.

## Compartilhe suas ideias ou dúvidas com os autores!



Sabia que o maior estímulo no desenvolvimento científico e cultural é a curiosidade? Deixe seus questionamentos ou sugestões para o autor!

Criar tópico

## Instituições

<sup>1</sup> Instituto de Física de São Carlos

<sup>2</sup> Weizmann Institute of Science / Weizmann Institute of Science / Department of Chemical and Biological Physics

## Eixo Temático

- 3. Estudantes de Graduação e Pós-Graduação (concorrentes ao prêmio)

## Palavras-chave

Transformada Inversa de Laplace

Relaxometria

Meios porosos

**Gustavo Solcia**

**Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo**

**Aluno de Doutorado**

**CONCORRENDO AO PRÊMIO**

## TRANSFORMADA INVERSA DE LAPLACE EM RELAXOMETRIA POR RMN: UMA PERSPECTIVA SOBRE SELEÇÃO DE PARÂMETROS

Gustavo Solcia<sup>1\*</sup>, Elton T. Montrazi<sup>2</sup>, Tito J. Bonagamba<sup>1</sup> e Fernando F. Paiva<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Departamento de física interdisciplinar, Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, Brasil; <sup>2</sup>Department of Chemical and Biological Physics, Weizmann Institute of Science, Rehovot, Israel

*\*gustavo.solcia@usp.br*

Palavras-chave: Transformada inversa de Laplace, Relaxometria, Meios porosos

### Introdução

A ressonância magnética nuclear (RMN) no domínio do tempo, ou simplesmente relaxometria, é habitualmente aplicada para estudar materiais porosos. [1] Os tempos de relaxação longitudinal e transversal podem ser utilizados para a determinação de distribuições correlacionadas com a distribuição de poros em amostras. Pode-se obter estas distribuições através da transformada inversa de Laplace, mas é necessário aplicar um método de regularização como o de Tikhonov. A regularização Tikhonov é aplicada para lidar com uma instabilidade relacionada com a representação matemática dos dados. Entretanto, a regularização resolve a instabilidade da solução, mas cria uma indeterminação de parâmetro. Este parâmetro é denominado como alfa e na prática estabelece a intensidade da regularização. Atualmente existem soluções que buscam determinar o alfa, mas a melhor forma ainda não é um consenso. [2] O objetivo deste trabalho é de melhorar o critério para a seleção de parâmetros da transformada inversa de Laplace e propor uma nova perspectiva para seu uso em RMN.

### Métodos

Essencialmente, estamos interessados em obter uma distribuição de tempos de relaxação  $g$  que seja relacionada com a magnetização

$$M = Kg + \varepsilon \quad (1)$$

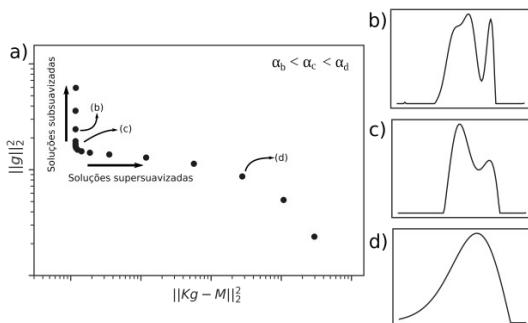
onde  $K$  é a matrix composta por componentes  $e^{-t_i/T_{2j}}$  com  $t_i \in \{t_{echo}, \dots, it_{echo}, \dots, (N-1)t_{echo}\}$  com  $N$  pontos no domínio do tempo e  $T_{2j}$  sendo os tempos de relaxação logaritmicamente espaçados. Assim, o método de regularização Tikhonov para esse problema faz com que a distribuição seja

$$g_\alpha = \operatorname{argmin} \{ 1/2 \|Kg - M\|_2^2 + \alpha/2 \|g\|_2^2 \}, \quad (2)$$

onde o termo  $\|Kg - M\|_2^2$  é o resíduo e  $\|g\|_2^2$  o termo da norma.

Simulamos distribuições log-Gaussianas de dois e três picos para emular distribuições de rochas de reservatório. As distribuições eram compostas por mil decaimentos exponenciais entre  $10^{-3}$  e 10 segundos, possuindo  $1,6 \cdot 10^4$  pontos no domínio do tempo em um total de cinco relações sinal-ruído (SNR, em inglês) de 5, 10, 20, 30 e 50 com 500 realizações de ruído para cada. Estes valores foram escolhidos para criar um sinal representativo variando de aplicações de baixo campo (SNR=5) até um SNR de laboratório (SNR=50).

Entre os métodos de escolha de parâmetros utilizados atualmente, o método da curva-L [3] é um dos mais indicados devido a sua estabilidade e simplicidade. Neste caso, a melhor solução é definida pelo parâmetro que minimiza tanto os valores de norma quanto de resíduo. O gráfico desses valores resulta em uma curva em formato de L, ou seja, o ponto que minimiza ambos os eixos é o ponto de máxima curvatura ou “cotovelo” da curva-L. Quando o valor de alfa é menor do que a condição ótima os parâmetros são subestimados e as distribuições apresentam formas abruptas e irreais. Além disso, quando o valor de alfa é maior do que a condição ótima, os parâmetros são superestimados e a distribuição perde detalhes. Essas propriedades são destacadas pela Figura 1.



**Figura 1** – Exemplificação da curva-L e suas propriedades em caso de distribuição simulada de dois picos. a) Curva-L resultante de uma série de parâmetros aplicados pela transformada inversa de Laplace. b) Exemplo de parâmetro subestimado resultando em distribuição com transições abruptas e irreais. c) A escolha de alfa indicada pelo método como região de máxima curvatura. d) Exemplo de distribuição proveniente de parâmetro superestimado com perda de detalhes sobre picos na distribuição.

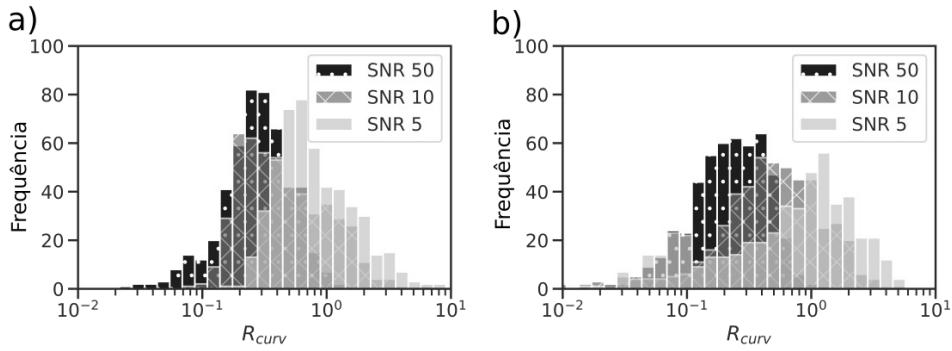
Para quantificar e verificar a condição de parâmetro ótimo, utilizamos uma métrica de similaridade entre a distribuição idealizada e a distribuição calculada através de um parâmetro alfa na forma

$$k_\alpha(\hat{g}_s, \hat{g}_\alpha) = \exp(-\|\hat{g}_s - \hat{g}_\alpha\|^2). \quad (3)$$

Assim, o parâmetro alfa ótimo é definido como  $\alpha_{opt} = argmax\{k\}$ . Consequentemente, também conseguimos definir a razão  $R_{curv} = \alpha_L / \alpha_{opt}$  onde quanto mais perto  $R_{curv}$  se torna de 1, melhor. Além disso, para valores menores que 1 o critério da curva-L está subestimado e para valores maiores ele está superestimado. Devido ao comportamento da curva-L analisado pela razão  $R_{curv}$ , foi proposta na próxima seção uma nova perspectiva sobre a seleção de parâmetros.

## Resultados e discussão

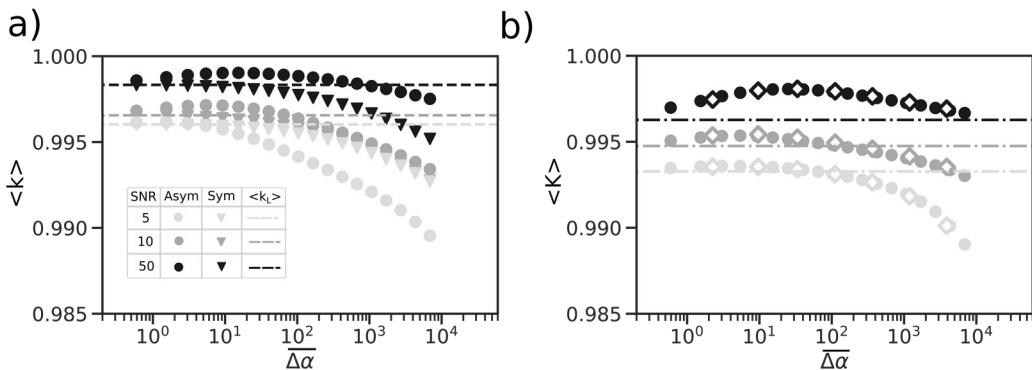
Analisamos a razão  $R_{curv}$  para visualizar e quantificar os efeitos da escolha de parâmetros da curva-L em 500 realizações de ruído. Os histogramas na Figura 2 evidenciam o comportamento de  $R_{curv}$  para SNRs de 5, 10 e 50 em distribuições de dois e três picos. Assim, podemos observar que grande parte das escolhas feitas pela curva-L estão subestimando o parâmetro alfa devido a frequência de  $R_{curv} < 1$ . Além disso, os histogramas apresentam uma largura que pode chegar a ultrapassar uma ordem de magnitude, indicando uma variabilidade de precisão.



**Figura 2** – Histogramas de  $R_{curv}$  para 500 realizações de ruído. a) Histogramas para os casos de distribuições de dois picos com SNRs representativos. b) Histogramas para os casos de distribuições de três picos com SNRs representativos.

Como identificamos que a curva-L subestima o parâmetro alfa além de possuir precisão variável, uma estratégia que leve em conta múltiplos parâmetros alfas podem gerar distribuições mais assertivas. Assim, podemos considerar intervalos de parâmetros simétricos e assimétricos em relação ao parâmetro da curva. Dado a subestimação, consideramos o intervalo assimétrico somente com valores maiores ou iguais a  $\alpha_L$ . De forma geral, os intervalos podem ser definidos como  $\Delta\alpha = (\alpha_f - \alpha_i)/\alpha_i$ , onde para o intervalo simétrico temos  $\{\alpha_{L-N}, \dots, \alpha_L, \dots, \alpha_{L+N}\}$  e para o assimétrico temos  $\{\alpha_L, \alpha_{L+2}, \dots, \alpha_{L+2N}\}$ .

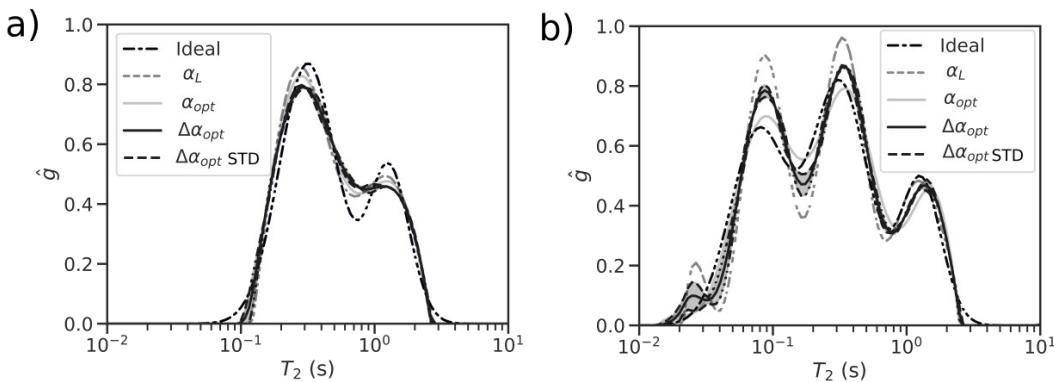
Resgatando a métrica de similaridade da Equação 3, comparamos os valores obtidos pelas estratégias de seleção de parâmetros na Figura 3. Na Figura 3a temos a similaridade média para SNRs de 5, 10 e 50 em distribuições de dois picos para uma densidade de 100 parâmetros considerados para solução. A linha pontilhada representa a similaridade da distribuição calculada pela curva-L em comparação com a distribuição ideal. Portanto, vemos que para uma estratégia assimétrica, existe um aumento de similaridade principalmente para SNRs mais altos. A Figura 3b mostra a comparação entre uma densidade de 100 e 40 parâmetros considerados para a solução em distribuições de três picos. Vemos que mudanças na quantidade de parâmetros não resulta em mudanças na métrica da estratégia assimétrica. A estratégia apresenta maior ganho de similaridade para distribuições de três picos.



**Figura 3** – Similaridade média das estratégias simétrica (triângulo), assimétrica (círculo), com menor quantidade de parâmetros (losangos) e de um único parâmetro (linha pontilhada). a) Comparação entre estratégias simétricas e assimétricas. Similaridade assimétrica é maior ou igual que simétrica em

distribuições de dois picos. b) Comparação entre uma densidade de 100 parâmetros (círculos) e 40 parâmetros (losangos) para distribuições de dois picos. Não há diferença devido a quantidade de parâmetros.

A diferença prática entre os resultados das distribuições pode ser visualizada na Figura 4. Em distribuições de dois picos como na Figura 4a, os resultados não se diferem do que seria a distribuição ideal ou da distribuição ótima com a maior similaridade possível. Isso ocorre tanto pela distribuição ser mais simples quanto pelo SNR do decaimento desta distribuição ser de 5. Já em distribuições mais complexas como a de três picos e com SNR de 50 na Figura 4b, existe uma variação entre os resultados. Neste caso, o maior ganho vai além da aproximação dos picos principais da distribuição ideal, onde existe a suavização de um pico inexistente próximo a  $10^{-2}$  s. É importante ressaltar que o uso de múltiplos parâmetros cria a possibilidade do uso do desvio padrão nas distribuições, facilitando uma análise de incertezas principalmente em regiões com sinais que não deveriam existir.



**Figura 4** – Distribuições para casos de dois e três picos de uma única realização de ruído. a) Comparação com distribuição de dois picos com SNR=5 para múltiplos critérios de seleção de parâmetros. b) Comparação com distribuição de três picos com SNR=50 para múltiplos critérios de seleção de parâmetros.

### Considerações finais

Neste trabalho apresentamos uma nova perspectiva da seleção de parâmetros para a transformada inversa de Laplace. A média de distribuições provenientes de múltiplos parâmetros é uma alternativa para lidar com vieses de seleção uma vez que as simulações mostraram um aumento de similaridade. O uso de um  $\Delta\alpha$  fixo de até uma ordem de grandeza pode ser uma abordagem mais confiável e robusta uma vez que também é possível analisar o desvio das curvas. Pretendemos testar esta estratégia em estudos futuros com dados reais de múltiplas origens.

### Referências:

- [1] Song, Y.Q., Journal of Magnetic Resonance, 2013, 229, 12-24.
- [2] Zou, Y.L., Xie, R.H., Arad, A., Petroleum Science, 2016, 13, 237-246.
- [3] Hansen, P.C., O'Leary D.P., SIAM Journal on Scientific Computing, 1993, 14, 1487-1503.

### Agradecimentos:

CNPq, CAPES, Petrobrás.