ZESZYTY NAUKOWE POLITECHNIKI ŚLĄSKIEJ 1979
Seria: MATEMATYKA-FIZYKA z. 32 Nr kol. 609

Józef SZPILECKI
Instytut Fizyki

PEWIEN WARIANT ROZWIĄZANIA RÓWNANIA BLOCHA-TORREYA DLA UKŁADÓW IMPULSOWYCH

Streszczenie. W pracy rozpatrzono jeden z wariantów rozwiązania równania Blocha-Torreya, opisującego zachowanie się wektora namagnesowania w przypadku pola magnetycznego, nieznacznie przestrzennie niejednorodnego, w postaci przydatnej do teorii echa spinowego (metoda Carra-Purcella). Funkcje, opisujące natężenie pola magnetycznego przedstawiono w postaci

$$H_i = \bar{H}_i + \Delta H_i, \quad i = 0,1,2 \tag{1}$$

gdzie $\bar{H}_i$ - stała przestrzennie składowa, ΔH_i - powoli zmienna funkcja współrzędnych przestrzennych ($\bar{H}_i \gg \Delta H_i$) (nieduże próbki).

Po diagonalizacji macierzy, opisującej zerowe przybliżenie, otrzymuje się równanie dające się prosto separować, które może być rozwiązane metodą funkcji Greena, podobnie jak w jednej z poprzednich prac autora.

Ze względu na złożone warunki początkowe i brzegowe, rozwiązanie przedstawiono w postaci sumy dwu funkcji. Równanie daje się rozwiązać metodą kolejnych przybliżeń. W końcowym etapie następuje powrót do pierwotnych zmiennych.

1. Wstęp

W pracach [1, 2, 3], opierając się na uogólnionych równaniach Blocha-Torreya, odnoszących się do przypadku przestrzennie niejednorodnego pola magnetycznego, otrzymuje się następujące równanie macierzowe, opisujące zachowanie się makroskopowego wektora namagnesowania M, przydatne do teorii echa spinowego (metoda Carra-Purcella)

$$\partial M/\partial t - (A_1 + A_2)M - \nabla^2(DM) = (\chi_o/T_1 - \nabla^2(D\chi_o))H, \tag{2}$$

przy czym w przedziałach czasowych, w których załączono dodatkowe pole magnetyczne $H_x = H_1$, $H_y = H_2$, postać macierzy A_1, A_2 jest następująca

$$A_1 = \begin{pmatrix} -1/T_2 & \gamma H_o & H_2-\gamma \\ -\gamma H_o & -1/T_2 & \gamma H_1 \\ \gamma H_2 & H_1-\gamma & -1/T_1 \end{pmatrix} \left[K(t_o,t_1) + K(t_2,t_3) + \ldots\right]$$

$$A_2 = \begin{pmatrix} H_1^2 & H_1H_2 & H_1H_o \\ H_2H_1 & H_2^2 & H_2H_o \\ H_oH_1 & H_oH_2 & H_o^2 \end{pmatrix} \left[1/T(H_o^2 + H_1^2 + H_2^2)\right]\left[K(t_o,t_1) + K(t_2,t_3) + \ldots\right] \quad (3)$$

gdzie:

$$1/T = 1/T_2 - 1/T_1, \quad (4)$$

H - wektor-kolumna o elementach $0, 0, H_o$, D - stały współczynnik dyfuzji, χ_o - stała podatność magnetyczna, H_i, $i = 0,1,2$ - składowe wektora natężenia pola magnetycznego, przestrzennie stałe w jednorodnym polu magnetycznym, powoli zmienne funkcje współrzędnych przestrzennych w niejednorodnym polu, przy czym prócz warunku (1) spełniony jest jeszcze

$$H_1, H_2 \ll H_o. \quad (5)$$

Funkcje komutacji

$$K(t_i, t_{i+1}) = \begin{cases} 1 \text{ dla } t_i < t < t_{i+1} \\ 0 \text{ na zewnątrz tego przedziału.} \end{cases}$$

W pozostałych przedziałach czasowych $(0, t_o)$, (t_1, t_2), ... przyjmujemy $H_1 = H_2 = 0$.

2. Przekształcenie równania (2) i jego rozwiązanie

Wystarczy rozpatrzeć rozwiązanie w przypadku macierzy (3) dla jednego przedziału czasowego. Przepisujemy je następująco

$$\partial M/\partial t - (B_1 + B_2)M - \nabla^2(DM) = (\chi_o/T_1 - D\nabla^2\chi_o)H, \quad (7)$$

gdzie:

$$B_1 = \begin{pmatrix} -1/T_2 & \gamma\bar{H}_o & 0 \\ -\gamma\bar{H}_o & -1/T_2 & 0 \\ 0 & 0 & -1/T_1+1/T \end{pmatrix} \tag{8}$$

$$B_2 = \begin{pmatrix} 0 & \gamma\Delta H_o & -\gamma(\bar{H}_2 + \Delta H_2) \\ -\gamma\Delta H_o & 0 & \gamma(\bar{H}_1 + \Delta H_1) \\ \gamma(\bar{H}_2 + \Delta H_2), & -\gamma(\bar{H}_1 + \Delta H_1), & 0 \end{pmatrix} +$$

$$+ \begin{pmatrix} \bar{H}_1^2 + \Delta H_1^2 & \bar{H}_1\bar{H}_2 + \Delta(H_1H_2) & \bar{H}_1\bar{H}_o + \Delta(H_1H_o) \\ \bar{H}_2\bar{H}_1 + \Delta(H_2H_1) & \bar{H}_2^2 + \Delta(H_2^2) & \bar{H}_2\bar{H}_o + \Delta(H_2H_o) \\ \bar{H}_o\bar{H}_1 + \Delta(H_oH_1), & \bar{H}_o\bar{H}_2 + \Delta(H_oH_2), & \Delta H_o^2 \end{pmatrix} \cdot$$

$$\cdot \left[1/T(\bar{H}_o^2 + \bar{H}_1^2 + \bar{H}_2^2 + \Delta(H_o^2 + H_1^2 + H_2^2))\right], \tag{9}$$

$$(\chi_o/T_1 - D\nabla^2\chi_o)H = (\chi_o/T_1)\bar{H} + (\chi_o/T_1 - D\nabla^2\chi_o)\Delta H \tag{10}$$

Macierz B_1 można prosto diagonalizować, posługując się macierzami a_o, b_o przekształceń

$$\tilde{M} = a_oM, \qquad M = b_o\tilde{M} \tag{11}$$

$$a_o = \begin{pmatrix} 1, & j, & 0 \\ j, & 1, & 0 \\ 0, & 0, & 1 \end{pmatrix}, \qquad b_o = (1/2)\begin{pmatrix} 1, & -j, & 0 \\ -j, & 1 & 0 \\ 0, & 0 & 2 \end{pmatrix} \tag{12}$$

$$j = \sqrt{-1}$$

W miejsce równania (7) otrzymujemy

$$\partial\tilde{M}/\partial t - (\bar{B}_1 + \bar{B}_2)\tilde{M} - \nabla^2(D\tilde{M}) = (\chi_o/T_1 - D\nabla^2\chi_o)H, \tag{13}$$

gdzie:

$$\bar{B}_1 = a_oB_1b_o = \begin{pmatrix} -1/T_2 + j\gamma\bar{H}_o & & \\ & -1/T_2 - j\gamma H_o & \\ & & 1/T - 1/T_1 \end{pmatrix} \tag{14}$$

$$B_2 = a_o B_2 b_o \tag{14}$$

$$\nabla^2 = a_o \nabla^2 b_o = \nabla^2 \tag{15}$$

$$(\chi_o/T_1 - D\nabla^2\chi_o)H = a_o(\chi_o/T_1 - D\nabla^2\chi_o) \tag{16}$$

Kierując się kryterium małości wyrażeń (założenia (1) i (5)), można napisać równanie (12) następująco

$$\partial\tilde{M}/\partial t - \bar{B}_1\tilde{M} - \nabla^2 D\tilde{M} = \overline{(\chi_o/T_1 - D\nabla^2\chi_o)H} - \bar{B}_2\tilde{M} \tag{17}$$

Jest to równanie różniczkowe cząstkowe. Wymaga się więc do jednoznaczności rozwiązania podania warunku początkowego i warunków brzegowych na ograniczeniach próbki. Ze względu na złożoność zagadnienia brzegowego szukamy rozwiązania w postaci sumy dwu funkcji

$$\tilde{M} = \tilde{M}_1 + \tilde{M}_2. \tag{18}$$

Funkcja $\tilde{M}_1$ spełnia równanie niejednorodne, warunek początkowy i zerowe warunki brzegowe. Funkcja $\tilde{M}_2$, odpowiednio dobrana i zależna od kształtu próbki, a więc od użytego układu współrzędnych, spełnia zerowy warunek początkowy i niejednorodne warunki brzegowe. Tę ostatnią funkcję wygodnie jest przedstawić w postaci sumy trzech funkcji, z których każda odnosi się do jednej zmiennej przestrzennej.

Po podstawieniu (18) funkcję $\tilde{M}_2$ i jej pochodne przenosimy, jako znane, na prawę stronę równania (17). Otrzymuje się w ten sposób niejednorodne równanie na wyznaczenie $\tilde{M}_1$.

$$\partial M_1/\partial t - \tilde{B}_1\tilde{M}_1 - {-}^{?}(D\tilde{M}_1) = -\partial\tilde{M}_2/\partial t + \nabla^2(D\tilde{M}_2) + \bar{B}_1\tilde{M}_2 +$$

$$+ \overline{(\chi_o/T_1 - D\nabla^2\chi_o)H} - \bar{B}_2(\tilde{M}_1 + \tilde{M}_2). \tag{19}$$

Jako rozwiązanie części jednorodnej równania przyjmujemy funkcję Greena. Budujemy ją w postaci sumy funkcji własnych. Jeżeli wskaźniki przynależne do funkcji własnych, odpowiadających poszczególnym współrzędnym, oznaczymy przez k,l,m, wtedy odpowiednią funkcję czasową otrzymujemy w postaci exp Ct, gdzie:

$$C = \mathrm{diag}(-\delta_{k,l,m} - 1/T_2 + j\gamma\bar{H}_o,\ -\delta_{k,l,m} - 1/T_2 - j\gamma\bar{H}_o,\ -\delta_{k,l,m} + 1/T - 1/T_1), \tag{20}$$

przy czym stały składnik $\delta_{k,l,m} > 0$, otrzymujemy z wyliczenia operatora ∇^2 dla funkcji o wskaźnikach k,l,m.

W ten sposób wpływ przestrzennej niejednorodności, opisany operatorem Laplace'a, występuje jako dodatkowe tłumienie funkcji czasowej.

Wygodnie jest przejść od równania (19) do równania całkowego na wyznaczenie $\tilde{M}_1(x_i,t)$

$$\tilde{M}_1(x_i,t) = -\int_0^{a_i}\int_0^{t} G(x_i,\xi_i,t,t_1)\bar{B}_2(\xi_i,t_1)(\tilde{M}_1 + \tilde{M}_2)d\xi_i dt_1 +$$

$$+ \int_0^{a_i}\int_0^{t} G(x_i,\xi_i,t,t_1) < \overline{(\chi_0/T_1 - D\nabla^2\chi_0)}H - \partial\tilde{M}_2/\partial t + \bar{B}_1\tilde{M}_2 +$$

$$+ \nabla^2(D\tilde{M}_2) > d\xi_i dt_1 + \int_0^{a_i} G(x_i,\xi_i,t)\tilde{M}(0)d\xi_i, \tag{21}$$

gdzie:

a_i i = 1,2,3 - wartości krańcowe poszczególnych zmiennych,

ξ_i, t_1 - zmienne parametry.

Operacje mnożenia funkcji $\tilde{M}_2$ i jej pochodnych przez funkcję Greena i całkowania sprowadzają się do przedstawienia tej funkcji przez rozwinięcie funkcji własnych. Wobec tego

$$\tilde{M}(x_i,t) = \tilde{M}_1(x_i,t) + \int_0^{a_i}\int_0^{t} G(x_i,\xi_i,t,t_1) < -\partial\tilde{M}_2/\partial t + \bar{B}_1\tilde{M}_2 +$$

$$+ \nabla^2(D\tilde{M}_2) > d\xi_i dt_1, \tag{22}$$

i równanie na $\tilde{M}$ ma postać

$$\tilde{M}(x_i,t) = -\int_0^{a_i}\int_0^{t} G(x_i,\xi_i,t,t_1)\bar{B}_2(\xi_i,t_1)\tilde{M}d_i dt_1 +$$

$$+ \int_0^{a_i}\int_0^{t} G(x_i,\xi_i,t,t_1) < \overline{(\chi_0/T_1 - D\nabla^2\chi_0)H} > d\xi_i dt_1 +$$

$$+ \int_0^{a_i} G(x_i,\xi_i)\tilde{M}(0)d\xi_i. \tag{23}$$

Równanie to można rozwiązać metodą iteracji, przyjmując jako zerowe przybliżenie

$$\widetilde{M}_o(x_i,t) = \int_0^{a_i}\int_0^{t} G(x_i,\xi_i,t,t_1)\overline{(\chi_o/T_1 - D\nabla^2\chi_o)H}d\xi_i dt_1 + \int_0^{a_i} G(x_i,\xi_i)\widetilde{M}(0)d\xi_i. \tag{24}$$

Jako następne przybliżenie otrzymujemy rozwiązanie równanie (23), w którym za $\widetilde{M}$ w pierwszym wyrazie, pominiętym poprzednio, podstawiono funkcję zerowego przybliżenia. Ogólnie, dla i = 1,2,3,...

$$\widetilde{M}_i(x_i,t) = -\int_0^{a_i}\int_0^{t} G(x_i,\xi_i,t,t_1)\overline{B}_2(\xi_i,t_1)\widetilde{M}_{i-1}(\xi_i,t_1)d\xi_i dt_1 + \widetilde{M}_o(x_i,t). \tag{25}$$

Powrotu do wielkości M dokonujemy przy pomocy podstawienia (11)

$$M = b_o\widetilde{M},$$

przez pomnożenie rezultatu rozwiązania równania (23) z lewej strony przez macierz b_o.

Istnieje również inna możliwość obliczenia. Mianowicie, przed rozwiązaniem równania (23) przechodzimy do M przez pomnożenie równania z lewej strony przez macierz b_o i następnie rozwiązujemy tak zmodyfikowane równanie całkowe.

W pracy [4] rozpatrywano również inny wariant rozwiązania, polegający na innym podziale macierzy $A_1 + A_2$ na sumę macierzy $B_1 + B_2$, przy czym

$$B_1 = \begin{pmatrix} -1/T_2, & \gamma\overline{H}_o & -\gamma\overline{H}_2 \\ -\gamma\overline{H}_o & -1/T_2 & \gamma\overline{H}_1 \\ \gamma\overline{H}_2 & -\gamma\overline{H}_1 & 1/T - 1/T_1 \end{pmatrix}, \tag{26}$$

po czym dalsze postępowanie jest analogiczne. Komplikują się jedynie transformacje, przeprowadzające M w $\widetilde{M}$. Odpowiednie macierze oznaczono

$$a_o + a \quad i \quad (2b_o + b)/(2 + \Delta), \tag{27}$$

przy czym macierze poprawkowe a, b oraz wielkość Δ obliczono w [5].

LITERATURA

[1] Szpilecki J., Zeszyty Naukowe Politechniki Śląskiej, Matematyka-Fizyka nr 11, 1966, 65-83,

[2] Szpilecki J., Zeszyty Naukowe Politechniki Śląskiej, Matematyka-Fizyka nr 12, 1967, 43-57.

[3] Szpilecki J., Materiały VIII Ogólnopolskiego Seminarium na temat: Magnetycznego rezonansu jądrowego i jego zastosowań, Kraków 1975, 77-81.

[4] Szpilecki J., Materiały IX Ogólnopolskiego Seminarium na temat: Magnetycznego rezonansu jądrowego i jego zastosowań, Kraków 1977, 167-171.

[5] Szpilecki J., Materiały IX Ogólnopolskiego Seminarium na temat: Magnetycznego rezonansu jądrowego i jego zastosowań, Kraków 1977, 162-166.

ОДИН ИЗ ВАРИАНТОВ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ БЛОХА-ТОРРЕЯ ДЛЯ ИМПУЛЬСНЫХ СИСТЕМ

Р е з ю м е

В работе рассматривается один из вариантов решения уравнения Блоха-Торрея, описывающего поведение вектора намагничивания в магнитном поле, незначительно пространственно неоднородном, в форме, служащей для использования теории спинового эха (метод Карра Пурселя).

Функции, описывающие интенсивность магнитного поля представлены в виде:

$$H_i = \bar{H}_i + \Delta H_i, \quad i = 0,1,2$$

где $\bar{H}_i$ - пространственно-постоянный компонент, ΔH_i - медленно изменяющаяся функция пространственных координат $(H_i \gg \Delta H_i)$.

После диагонализации матрицы, описывающей нулевое приближение, получается уравнение, которое может быть решено методом функции Грина, так же как и в одной из предыдущих работ автора. Из-за сложных начальных условий решение представлено вформе суммы двух функций.

Уравнение может быть решено методом последовательных приближений. В конечном итоге следует возвращение к первоначальным переменным.

ONE POSSIBLE FORM OF BLOCH TORREY EQUATION SOLUTION FOR PULSE SYSTEMS

S u m m a r y

In the paper is one of possible forms of Bloch Torrey equation solutions regarded, describing the magnetization vector behaviour in the case of magnetic field, a few space-inhomogenous, in the for spin echo theory

(Carr Purcell method) useful form. The magnetic field intensity is in the form assumed

$$H_i = \bar{H}_i + \Delta H_i, \quad i = 0,1,2,$$

where $\bar{H}_i$ - spece-constant component, ΔH_i - slowly variable function of space coordinates, ($\bar{H}_i \gg \Delta H_i$) (little sample).

After zero approximation matrix diagonalization, one receives any easily separable equation, which can be solved by Green function method, similarly as in one of the previous authors papers.

In spite of complex initial and boundary conditions, the solution is assumed as sum of two functions. The equation can be with use of iterative method solved. Finally the primitive variables are introduced.