



UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO  
DEPARTAMENTO DE FÍSICA – CCEN  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

## DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

INVESTIGAÇÃO DE MÉTODOS ANALÍTICOS PARA OTIMIZAÇÃO  
TEMPORAL DO PROCESSO DE SATURAÇÃO EM RMN

CÉSAR AUGUSTO AGUDELO ARANGO

Recife  
2014



UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO  
DEPARTAMENTO DE FÍSICA – CCEN  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

## DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

INVESTIGAÇÃO DE MÉTODOS ANALÍTICOS PARA OTIMIZAÇÃO  
TEMPORAL DO PROCESSO DE SATURAÇÃO EM RMN

por

CÉSAR AUGUSTO AGUDELO ARANGO

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Pernambuco, como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Física.

**Banca Examinadora:**

Profº. Dr. Wilson Barros Júnior (Orientador, DF-UFPE)

Profº. Dr. Alessandro de Sousa Villar (DF-UFPE)

Profº. Dr. Jorge Luis Neves (DQF-UFPE)

Recife  
2014

Catálogo na fonte  
Bibliotecária Joana D'Arc Leão Salvador CRB4-532

A662i Arango, César Augusto Agudelo.  
Investigação de métodos analíticos para otimização temporal do processo de saturação em RMN / César Augusto Agudelo Arango. – Recife: O Autor, 2014.  
87 f.: fig.

Orientador: Wilson Barros.  
Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal de Pernambuco. CCEN. Física, 2014.  
Inclui referências e apêndices.

1. Ressonância magnética nuclear. 2. Relaxação (Física nuclear).  
I. Barros, Wilson (Orientador). II. Título.

538.362 CDD (22. ed.) UFPE-FQ 2014-52

CÉSAR AUGUSTO AGUDELO ARANGO

**INVESTIGAÇÃO DE MÉTODOS ANALÍTICOS PARA OTIMIZAÇÃO  
TEMPORAL DO PROCESSO DE SATURAÇÃO EM RMN**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Pernambuco, como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Física.

Aprovada em: 29/09/2014.

**BANCA EXAMINADORA**

---

Profº. Dr. Wilson Barros Júnior (Orientador)  
Universidade Federal de Pernambuco

---

Profº. Dr. Alessandro de Sousa Villar (Examinador Interno)  
Universidade Federal de Pernambuco

---

Profº. Dr. Jorge Luis Neves (Examinador Externo)  
Universidade Federal de Pernambuco

*está dedicado a todos aqueles que lá estiveram ...*

## AGRADECIMENTOS

Agora que eu sou capaz de completar este trabalho, o que não tem sido fácil para mim, eu quero agradecer e desatacar todos aqueles que me apoiaram incondicionalmente e maneira especial durante este tempo.

Primeiro quero agradecer a todos os professores de pós-graduação em Física da UFPE e especialmente meus tutores Wilson Barros e Jorge Neves (DQ) por tudo o que me ajudou e ensinou ao longo deste processo. Idéias também contribuiu e monitoramento contínuo da evolução do mesmo. Agradeço também ao tempo e esforço despendido investido, sem o qual este trabalho não visto a luz.

Eu também tenho sido muito úteis encontros acadêmicos e discussões com o professor Jorge.

Eu também tenho sido muito úteis encontros acadêmicos e discussões com o professor Jorge.

Tive a sorte de estar em um departamento de física com valioso e amigável companheiros, que me ajudou com a sua alegrias e suas piadas. Quero agradecer a todos que estiveram lá. Especialmente Alberto, Javier, Lenin, Alison, Wilmer, Alejo, Ariday, Diego e Mariana,

Então, mesmo se ele nunca vai vê-los esses anos, tanto quanto eu queria, mas sempre me ajudou a distância, como Marcela, Yenny, Mariela, Ricardo, Mulato, Josue, Rosieane, Silvia e Regina, minha família e amigos queridos.

Agradecemos também especialmente Alberto, Juana, Alsenir e família que me deu bons momentos de amizade e companhia, como tem sido essencial durante este tempo.

Finalmente, a pessoa que a maioria sofreu nesta secção da minha vida, e deu sentido a tudo que faço. Isso foi Marcela, que tem estado comigo e me deu a força especial para fazer todo este trabalho.

César A. Agudelo.

«... "Se rompió la rutina de una amarga resignación y ahora puede brotar libremente una renovadora, una santa indignación. Y de la dispersión mecánica de nuestras vidas, en los dormitorios y puestos de trabajo, surge la comunidad, la asamblea que delibera, grita, teme y calcula. Ahora no es necesario aturdirse de fútbol y de alcohol, porque el pensamiento se ha vuelto interesante y útil y ha dejado de ser simple incremento del dolor de nuestras vidas que solo le agrega la conciencia de su insensatez."»

*Estanislao Zuleta.*

## Resumo

Realizamos um estudo do método de otimização geométrico de Pontryagin. Em particular, avaliamos as soluções ótimas para o problema de saturação, no contexto de RMN, para um conjunto de spins  $1/2$  na presença de relaxação. A solução analítica desse problema permite o entendimento de trajetórias regulares e singulares que são encontradas durante o processo de otimização. As soluções das equações de Bloch que incluem variáveis de controle externa (campos de radiofrequência) e são otimizadas no processo, são obtidas também de forma analítica utilizando um método matricial. As soluções favorecem a percepção física do processo de otimização em contraste com os métodos numéricos que, apesar de eficientes, não fornecem formas analíticas para os controles de variável externa. A presença de relaxação transversal  $T_2$  e longitudinal  $T_1$  no processo é fundamental para as vantagens do método quando comparado com as metodologias predominantes na literatura, em particular, a técnica de saturação por inversão-recuperação. Finalmente avaliamos vários cenários em função da amplitude das variáveis de controle e de tempos de relaxação para amostras de interesse.

**Palavras Chave:** Extremais singulares. Relaxação transversal. Relaxação longitudinal. Equações de Bloch. Inversão-Recuperação. RMN.

## Abstract

We conducted a study of the geometrical optimization method of Pontryagin. In particular, we evaluated the optimal solutions the saturation problem in the NMR, context for a set of spin  $1/2$  in the presence of relaxation. The analytical solution of this problem enables the understanding of regular and singular trajectories that are found during the optimization process. The solutions of the Bloch equations that include variables external control (radio frequency fields) and are optimized in the process, are also obtained analytically using a matrix method. The analytical solutions promote the perception of physical optimization process in contrast to the numerical methods, although effective, do not provide analytical forms for external control variable. The presence of transverse relaxation  $T_2$  and longitudinal  $T_1$  in the process is essential to the advantages of the method compared with the predominant methodologies in the literature, in particular, the technique saturation inversion recovery. Finally we evaluate several scenarios depending on the amplitude of the control variables and relaxation times for samples of interest.

**Keywords:** Singular extremals. Transverse relaxation. Longitudinal relaxation. Bloch equations. Inversion Recovery. RMN.

# Lista de Figuras

1.1	A Frequência de precessão no sistema de laboratório em função da posição ao longo do eixo selecionado. A frequência central e a largura de banda do pulso RF são tais que a camada de largura $\Delta z = TH$ é uniformemente excitado (isto é, todos os spins dentro dessa faixa satisfaz a condição de ressonância.) . . . . .	17
2.1	Diagrama que ilustra mais visivelmente a formação do <i>eco</i> de spin. . .	29
2.2	Sequência de pulsos Gradiente- <i>Eco</i> . Depois da aplicação de um pulso para criar uma inclinação pequena ao ângulo, o gradiente negativo em $x$ leva um desfasamento dos spins. . . . .	31
2.3	Evolução temporal da magnetização em ressonância durante um pulso de inversão. O vector da magnetização inicial $\vec{M}(0)$ está alinhado com o campo magnético $\vec{B}_0$ ao longo do eixo- $z$ . No pulso RF de inversão $\vec{B}_1$ aplicado ao longo do eixo- $x$ gira no vector magnetização no plano $yz$ em torno a $x$ . (a) No final do pulso em no tempo $t$ , a magnetização $\vec{M}(t)$ está alinhado ao longo do eixo- $z$ negativo, sempre que o ângulo de inclinação seja $180^\circ$ . (b) Quando o ângulo de inclinação se afasta de $180^\circ$ , e a inversão não é total e se produz a magnetização transversal $\vec{M}_y$ . (c) Uma sequência de pulsos IR, que consistindo de um módulo de IR e uma sequência de pulsos agrupados, separados pelo tempo da inversão (TI). $\theta_{inv}$ e $\theta_{ex}$ são os ângulos dos pulsos RF da inversão e a excitação, respectivamente. . . . .	32

2.4	Comportamento da magnetização em o sistema girante durante uma experiência de <i>spin lock</i> em ressonância. Neste caso o campo de rf é aplicado em ressonância e os campos locais são negligenciáveis em comparação com a intensidade de comparada $\mathbf{B}_1$ . . . . .	34
2.5	Sequência de pulsos <i>spin-Lock</i> . . . . .	34
2.6	Sequência de pulsos Gradiente- <i>Eco</i> . Depois da aplicação de um pulso para criar uma inclinação pequena ao ângulo, o gradiente negativo em $x$ leva um desfasamento dos spins. . . . .	35
2.7	Sinais unidimensionais localizas de um objeto hipotético em na presença de um gradiente com frequência-codificada. . . . .	37
2.8	Sinais unidimensionais localizas de um objeto hipotético em na presença de um gradiente com frequência-codificada. . . . .	38
3.1	Para (a) e (b) $y(0) < 0$ onde a linha vermelha (linha contínua) é a magnetização em a direção $z$ , a linha azul (tracejada) é a solução da magnetização em a direção $y$ . Para (c) e (d) $y(0) > 0$ onde a linha vermelha (linha contínua) é a magnetização em a direção $z$ , a linha azul (tracejada) é a solução da magnetização em a direção $y$ . . . . .	55
3.2	Forma da distribuição geométrica global do campo vectorial $\vec{F}_0 + u\vec{F}_1$ para os pontos fixos $u = -2\pi$ (esq), $u = 0$ (meio), e $u = 2\pi$ (dir). As setas pequenas representam a direção e o módulo de $\vec{F}_0 + u\vec{F}_1$ em $(y, z)$ . Os valores dos parâmetros são $\Gamma = 0.0418$ e $\gamma = 0.515$ . . . . .	57
3.3	Representação dos campos vectoriais $\vec{F}_0$ e $\vec{F}_1$ (esq e dir). Na figura central temos o conjunto de pontos que formam $C$ e $S$ , (elipse) e (linha vertical e horizontal) respectivamente. . . . .	58
3.4	(a) Representação das trajetórias ótimas (vermelho-azul) e a sequência Inversion Recovery (IR) (vermelho-verde) no plano $(y, z)$ , para $T_1 = 740$ ms, $T_2 = 60$ ms, e $\frac{\omega_{\max}}{2\pi} = 32.2$ Hz. (b) se mostra um zoom da trajetória ótima perto no origem. (c) as leis do controle para cada caso. . . . .	63

3.5	Representação das trajetórias ótimas (parte esquerda) e a sequência Inversion Recovery (IR) (parte direita) para $\frac{\omega_{\max}}{2\pi} = 2.7, 10, 32.3, 50$ e 200 Hz. As zetas indicam no sentido seguido pelas trajetórias. . . . .	66
3.6	Evolução do vector magnetização ao longo da trajetória ótima para $\Gamma = 0.1048, 2241$ e 0.5160 (cyan, amarelo, vermelho) onde $\gamma =$ 0.0418 e $\frac{\omega_{\max}}{2\pi} = 32.3$ Hz estão fixos. . . . .	68

# Sumário

## Lista de Figuras

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>14</b>
1.0.1	Imageamento por Ressonância Magnética Nuclear (IRMN)	14
1.1	Sistemas Dinâmicos . . . . .	18
1.1.1	Teoria de Controle . . . . .	19
<b>2</b>	<b>Princípios da RMN</b>	<b>22</b>
2.1	Princípios da Ressonância Magnética Nuclear . . . . .	22
2.1.1	Efeitos dos Campos Magnéticos Dependentes do Tempo . . . . .	25
2.1.2	Equações de Bloch . . . . .	26
2.1.3	Detecção de Sinal . . . . .	27
2.1.4	Geração de Pulsos RMN Base . . . . .	27
2.1.5	Ecos de Gradiente . . . . .	30
2.1.6	Sequências de Pulsos Inversão Recuperação (IR) . . . . .	31
2.2	Relaxação em o Sistema Girante . . . . .	33
2.3	Geração de Imagens . . . . .	35
2.3.1	Codificação do Espaço . . . . .	35
2.3.2	Imagem Unidimensional . . . . .	36
2.4	Contraste . . . . .	39
<b>3</b>	<b>Método Geométrico de Controle Ótimo e o Problema de Saturação de Magnetização</b>	<b>41</b>

3.1	Teoria de Controle Ótimo . . . . .	43
3.1.1	Princípio do Máximo de Pontryagin . . . . .	43
3.1.2	Problema de Controle do Tempo Mínimo . . . . .	45
3.1.3	Determinação dos Extremos Singulares . . . . .	46
3.2	Desenvolvimento do Modelo . . . . .	47
3.3	Solução Analítica das Equações de Bloch . . . . .	51
3.4	O Princípio Máximo de Pontryagin . . . . .	55
3.5	Tempo Ótimo de Controle em Partículas de Spin 1/2 . . . . .	61
3.5.1	O Problema de Controle da Saturação . . . . .	61
3.6	Resultados Importantes . . . . .	65
3.6.1	Comportamento das sequências ótimas para diferentes frequências . . . . .	65
3.6.2	Comportamento das sequências ótimas em função dos tempos de relaxação . . . . .	66
<b>4</b>	<b>Conclusões e perspectivas</b>	<b>69</b>
	<b>Refêrencias</b>	<b>72</b>
<b>A</b>	<b>Apêndice: Equações de Bloch</b>	<b>76</b>
<b>B</b>	<b>Apêndice: Solução Analítica das Equações de Bloch</b>	<b>78</b>
<b>C</b>	<b>Apêndice: Desenvolvimento de Relações Importantes</b>	<b>85</b>
C.1	Obtenção das Raízes de um Polinômio Cúbico . . . . .	85
C.2	Desenvolvimento dos Braket de Lie . . . . .	86

# Capítulo 1

## Introdução

### 1.0.1 Imageamento por Ressonância Magnética Nuclear (IRMN)

O Imageamento por Ressonância Magnética Nuclear (IRMN) é uma técnica baseada nos princípios da Ressonância Magnética Nuclear (RMN), é capaz de produzir imagens de elevada qualidade e é utilizada principalmente em a medicina. No entanto, a aplicação da imagens por RMN em materiais tem uma ampla gama de aplicações, tanto em pesquisa teórica como aplicada na industria. A RMN, pode ser aplicada a tecidos biológicos, das plantas, alimentos e muitas outras variedades de materiais sintéticos. Os aparelhos usados para a RMN são equipamentos com campos magnéticos fortes para alinhar a magnetização dos núcleos atômicos. Com radio frequência (rf) são perturbados os spins nucleares quebrando o alinhamento da magnetização com o campo magnético, obtendo-se assim um campo magnético girante que pode ser detectado. Estes sinais podem ser manipulados com a ajuda de outro campo magnético externo para a geração de gradiente de campo; que tem a particularidade de variar linearmente em uma direção conhecida (condição espacial) para poder assim construir uma imagem da mostra.

Felix Bloch e Edward Purcell [1, 2], ganhadores do premio Nobel no ano 1952, encontraram independentemente o fenômeno da RMN em 1946, Desde 1950 até 1970 foi usada utilizado para o análise molecular físico e químico. Em 1971 foi publicado

pela revista Science uma pesquisa de Raymond Damadian [3] na qual demonstrava-se que os tempos de relaxação magnética de tecidos saudáveis e tumores malignos diferiam o que resultou em inúmeras investigações sobre a detecção das doenças utilizando a RMN. Em 1973 P. Lauterbur [4] obteve de forma pioneira fazer uma imagem com ressonância magnética em pequenas mostras, utilizando gradientes de campo magnético para codificar o espaço, uma técnica semelhante à tomografia computada apresentado no mesmo ano por Hounsfield. Ele chamou seu método *Zeugmatografia* (de zeugma=união), referindo-se à união de um campo magnético com a radiofrequência. Em 1975 Richard Ernst propôs o desenvolvimento da imagens usando uma codificação de fase e frequência, aplicando a transformada de Fourier e formando assim a base das técnicas de MRI atuais [5]. Poucos anos depois, em 1977 Peter Mansfield desenvolvem a Imagem de Eco Plano (EPI), que depois foi desenvolvida para assim gerar uma imagem em vídeo a 30ms/imagem.

Em 1980 Edelstein e colegas obtiveram imagens do corpo humano usando a técnica de Ernst, aquisição foi realizada em 5 minutos. Um rápido desenvolvimento das técnicas em 1986 permitem reduzir o tempo de aquisição para apenas 5 segundos, sem perder a resolução na imagem. Em 1991 Richard Ernst recebeu o prêmio Nobel em Química, por sua contribuição na desenvolvimento da RMN e IRM. No início dos anos 90s foi desenvolvido a IRM funcional (fIRM) para o mapeamento de varias regiões do cérebro. Em 1994 pesquisadores da Universidade Estadual de New York desenvolvem uma imagem de gás  $^{129}\text{Xe}$  hiperpolarizado para estudos respiratórios. Em o ano 2003 foi concedido o prêmio Nobel de Medicina para Paul C. Lauterbur e Peter Mansfield por suas descobertas em IRM.

Para a produzir uma imagem por RMN é preciso a utilização um campo externo  $B_0$  e um campo magnético dependente do tempo e a posição  $B(t, r)$ , o que significa ter um gradiente de campo magnético.

Assim, a equação que relaciona à frequência de ressonância de Larmor dos spins nucleares  $\omega(z)$  com a magnitude do campo magnético  $B(z)$ :

$$\omega(z) = \gamma B(z), \quad (1.1)$$

que nos diz que, se este campo varia linearmente com a posição, também o faz a frequência de Larmor. Assim o sinal de RMN será composto por vários componentes cuja frequência que depende da posição em o espaço e assim, cada plano da amostra perpendicular à direção do gradiente de campo magnético caracteriza-se por uma única frequência de precessão os spins nesse plano.

Se fizermos um experimento com um único gradiente de campo magnético, por exemplo na direção  $z$ , através da transformada de Fourier do sinal de RMN é possível obter uma imagem em uma dimensão da mostra, ou projeção da densidade de spins ao longo da direção do gradiente.

Com a aplicação de dois gradientes adicionais perpendiculares entre si e com o primeiro se podem obter imagens de dois ou três dimensões, depois de aplicar a transformada de Fourier em cada caso.

Por exemplo, a aplicação de um rf com largura de banda finita centrada an frequência de Larmor do campo estático com o gradiente de campo, o que leva a uma excitação de uma camada, de espins ortonormal para o gradiente com uma largura TH.

### Relaxação e Contraste

Um ponto importante a ser considerado é a intensidade do sinal, que está sendo afetada pelos processos de relaxação. O sistema de spins à energia entre os diferentes estados os spins, tendem a orientar a magnetização na direção do campo magnético estático  $B_0$ , definido na direção  $z$ . Esta restauração pode ser caraterizada por um tempo constante  $T_1$  chamado *relaxação longitudinal* (a o longo do campo  $B_0$  constante) e surge da interação entre os spins e seu ambiente atômico. A evolução temporal da magnetização é descrito por as equações de **Bloch**, que incorporam os efeitos de relaxação e precessão. O sinal de RMN, entretanto, provem de um estado de não-equilíbrio obtido pelo RF. Os tempos caraterístico, chamado tempos de relaxação, determinam o retorno da magnetização ao equilíbrio.

A outra forma de relaxação presente é devido à desfasagem dos spins, ou relaxação spin-spin, que representa o decaimento da componente transversal da magneti-

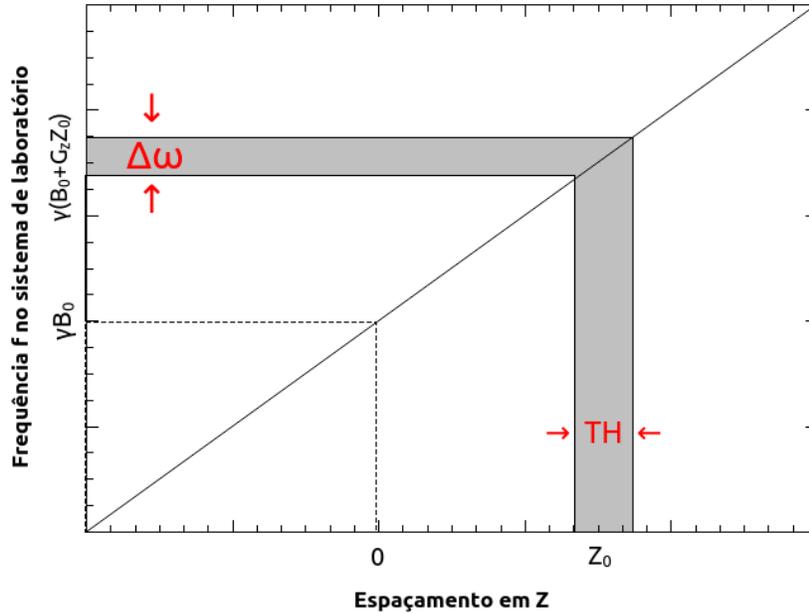


Figura 1.1: A Frequência de precessão no sistema de laboratório em função da posição ao longo do eixo selecionado. A frequência central e a largura de banda do pulso RF são tais que a camada de largura  $\Delta z = TH$  é uniformemente excitado (isto é, todos os spins dentro dessa faixa satisfaz a condição de ressonância.)

zação. Da mesma maneira, a inhomogeneidade dos campos externos contribui para o deslocamento de fase do sinal, por conseguinte, têm  $T_2$  que neste caso substituí-lo com um tempo menor chamado  $T_2^*$ .

A IRM pode ser usada para diferenciar materiais dentro de uma amostra, por causa da sua sensibilidade para a densidade de prótons, tempos de relaxação, e heterogeneidade dos tecidos. A possibilidade de utilização de um grande número de variáveis que podem gerar imagens com diferentes níveis de contraste, conforme necessário, tornando esta técnica bastante versátil.

Na prática a obtenção de contraste entre regiões distintas em imagens por RMN nem sempre é possível do ponto de vista prático. Os tempos de relaxação e a duração das sequências de pulso as vezes encontram-se em escalas temporais muito distintas. Isso pode acarretar tanto longo tempos de medida quanto uma qualidade

de contraste reduzida na região específica de interesse. Técnicas alternativas para a melhoria de contraste por meio de métodos de otimização de pulsos de rf tem se tornado bastante populares. A implementação de métodos de controle ótimo buscando reduzir tempo e melhorar contraste sera o tema principal dessa dissertação.

## 1.1 Sistemas Dinâmicos

Os sistemas dinâmicos são sistemas cujos parâmetros internos (variáveis de estado) seguem uma série de regras temporais. Chamam-se sistemas porque estão descritos por um conjunto de equações e dinâmicos porque os parâmetros variam com respeito alguma variável que geralmente é o tempo [6]. Os sistemas dinâmicos é dividida em dois grandes classes: aquelas em os que o tempo varia continuamente e em os que o tempo transcorre discretamente. Os sistemas dinâmicas de tempo contínuo são expressados em equações diferenciais; as quais podem ser equações diferenciais ordinárias (ODEs), equações diferenciais em derivadas parciais (PDEs) e equações diferenciais com retardos (DDEs). Por outro lado se o tempo é discreto os sistemas são descritos por meio de equações diferenciais (DEs), também conhecidas como mapas iterados.

Um sistema dinâmico contínuo  $n$ -dimensional pode ser representado pela equação

$$\dot{\mathbf{q}} = \mathbf{f}(q, t), \quad (1.2)$$

onde  $\mathbf{q} = [q_1, \dots, q_n]^T \in \mathfrak{R}^n$  é o vector dos estados e  $\mathbf{f} = [f_1(q), \dots, f_n(q)]^T : \mathfrak{R}^n \mapsto \mathfrak{R}^n$ .

Agora, sem dúvida o análise de sistemas dinâmicos podem melhorar nossa compreensão dos fenômenos que nos rodeiam. Mas, além do análise o objetivo superior é poder influenciar no comportamento do sistema através do controle ou o desenho. O campo da teoria de controle têm esse objetivo geral. Como caso particular dos sistemas dinâmicos são os problemas de controle ótimo pode ser formulado tanto para tempos discretos como para os tempos contínuos. Por conseguinte, para nosso

caso trataremos o problema para tempos contínuos onde os resultados do Princípio Máximo de Pontryagin (PMP) são mais fortes. Porém, as formulações para tempos discretos também são tratados com frequência, especialmente em sistemas de grande escala, desenvolvidos por computadores digitais aplicando métodos de otimização.

### 1.1.1 Teoria de Controle

O objetivo da Teoria de Controle é manipular o comportamento de um sistema dinâmico por meio de ações externas, de modo que satisfaçam certas condições pré-definidas, por exemplo, ter um ponto ou extremidade fixa, ou as duas onde determinadas variáveis não podem atingir alguns valores ou outras situações mais ou menos complicadas. Neste trabalho, vamos nos concentrar no caso em que os dois estados extremos, os estados inicial e final são fixos, mas outras situações mais gerais têm tratamento similar [7, 8]. A equação que descreve a evolução dos estados para um problema deste tipo é um sistema de equações diferenciais:

$$\dot{\mathbf{q}}(t) = \mathbf{f}(q(t), u(t)) \quad (1.3)$$

onde  $q$  representa as variáveis que descrevem o estado do sistema e  $u$  descrevem ações ou controles externos. Sobre a Teoria de Controle Ótimo, além disso, queremos que o sistema verifique uma condição adicional, que normalmente é minimizar (ou maximizar) uma forma funcional, ou seja, nós queremos encontrar trajetórias  $\eta(t) = (q(t), u(t))$  suficientemente regulares, por exemplo,  $C^1$  por partes, com as extremidades fixas no espaço de estado,  $q(0) = q_0$  e  $q(T) = q_T$ , que satisfaçam a equação de controle (1.3) e que também minimizem o seguinte funcional, chamado funcional de custo, em algum espaço de caminhos admissíveis:

$$S_{\min}(\eta) = \int_0^T L(q(t), u(t)) dt \quad (1.4)$$

$$= \int_0^T (p\dot{q} - H) dt \quad (1.5)$$

onde  $L(q(t), u(t))$  é uma função que depende das componentes e os controles para os quais  $T$  é a duração do controle. O Lagrangiano é relacionado com o hamiltoniano  $H$ , usando as equações de movimento de Hamilton. Por enquanto usando que se  $L$  é mínimo o hamiltoniano é máximo. Os caminhos  $\eta(t)$  que satisfaçam todas estas condições serão ditas ótimas [7].

Para resolver essa classe de problemas, foram desenvolvidos um amplo número de ideias, técnicas e resultados matemáticos. Além disso ferramentas analíticas e numéricas têm desfrutado de uma grande prestígio; podemos perceber que cada vez torna-se mais importante o ponto de vista geométrico na teoria de controle, já que os gradientes das contastes do movimento em no hamiltoniano descrevem as variações em os contornos do sistema obtendo assim as trajetórias ótimas. Possivelmente, a introdução do ponto de vista geométrico na teoria de controle foi iniciada por *L. Pontryagin* e seus colaboradores [7, 8] como certamente *R. Brockett* no estudo de problemas de controle em áreas e grupos de Lie. [9–11]

Assim, a teoria de controle pode ser formulada em termos geométricos e obter resultados intrínsecos próprios do sistema. No próximo capítulo, o objetivo é aplicar os métodos da geometria (variações das trajetórias dos campos vectoriais utilizando os gradientes das coordenadas) para descrever intrinsecamente a Teoria de Controle Ótimo. O que faremos é estabelecer um quadro axiomático o suficientemente geral para poder assim chegar a nosso caso particular usando uma analogia com a mecânica Lagrangiana.

Esta dissertação se estende por mais quatro capítulos:

- O Segundo Capítulo apresenta os argumentos teóricos em RMN, IRM e da teoria do controle ótimo. Apresenta-se sem entrar em detalhes, o Teorema do Princípio Máximo de Prontryagin (PMP) e suas soluções que são frequentemente chamadas de soluções “bang-bang”, e estudamos também o Problema de Controle de Tempo Mínimo que é definido geralmente para todos os casos onde PMP não tem uma solução explicita, esse caso é para quando funções

são do sistema de equações são acopladas ou implícitas, esse tipo de soluções são chamadas “singulares”.

- No Terceiro Capítulo desenvolve-se a teoria para um método proposto de o cálculo das equações de Bloch explicitamente durante o pulso rf aplicada; depois usamos a teoria de controle para determinar os pulsos que atendam tempos mínimos onde nós interpretamos os resultados da teoria matemática é executada e comparada com os resultados experimentais (feitos por nos ou compararmos com os que está em os artigos). Se inclui uma descrição detalhada os valores da magnetização, tempos de relaxação para as diferentes valores deles que são analisadas e comparadas com os resultados obtidos em outros artigos.

Discutimos os resultados obtidos como as soluções gerais analíticas das equações de Bloch durante o pulso rf aplicado. Também são apresentados os resultados ou aplicar-se pulsos sucessivos que compara os resultados teórico e os experimentais.

- Por fim, no Quarto e último capítulo apresentamos as conclusões e as perspectivas futuras da pesquisa incluindo alguns cálculos detalhada como anexos.

# Capítulo 2

## Princípios da RMN

### 2.1 Princípios da Ressonância Magnética Nuclear

A ressonância magnética é um fenômeno que ocorre em sistemas que têm momento magnético angular. Um sistema de núcleos tem um momento magnético  $\mu$  e um momento angular  $J$ , que estão ligados por uma constante chamada razão giromagnética  $\gamma$ , cuja relação é da forma

$$\vec{\mu} = \gamma \vec{J} \quad (2.1)$$

Aplicando um campo magnético  $B_0$  no direção  $z$  ocorre uma interação entre o campo e os núcleos que pode ser representada pelo hamiltoniano de energia

$$B = -\gamma h B_0 I_z \quad (2.2)$$

Os valores próprios do hamiltoniano de interação são proporcionais aos valores próprios de  $I_z$ , assim, as energias permitidas são:

$$E = -\gamma h B_0 m_I, \quad m_I = I, I - 1, \dots, -I \quad (2.3)$$

Para detectar estes níveis de energia é aplicado um campo magnético variável perpendicular ao campo estático  $B_0$ , produzindo transições entre os níveis permitidos. Escrevendo no termo de perturbação em função da amplitude  $B_0$ .

$$H_{\perp} = -\gamma\hbar B_{0,x} I_x \cos(\omega t) \quad (2.4)$$

O operador  $I_x$  tem elementos de matriz entre os estados  $m_I$  e  $m'_I$ , diferentes de zero apenas quando  $m_I = m'_I \pm 1$ , ou seja, as transições permitidas são apenas entre níveis adjacentes da energia.

$$\hbar\omega = \Delta E = \gamma\hbar B_0 \quad \implies \quad \omega = \gamma B_0. \quad (2.5)$$

Se temos uma amostra macroscópica em que observamos detalhado acima, onde por simplicidade, vamos supor que tem spin  $1/2$ , com uma população  $N_+$  para o estado  $m = 1/2$  e  $N_-$  para o estado  $m = -1/2$ . Como resultado do campo magnético variável aplicado então os níveis populacionais variam, mas o número total de spins  $N$  permanecem constante [4,5,12-14]. Também é definida a diferença das populações entre dois estados de spin. A razão das populações é dada por

$$\frac{N_-}{N_+} = \exp\left(-\frac{\Delta E}{k_B T}\right) \quad (2.6)$$

onde  $\Delta E = \gamma\hbar B_0$  é a diferença da energia entre dois níveis. Agora, se a probabilidade de transição do nível  $1/2$  para o nível  $-1/2$  é chamado  $W_{\uparrow}$  e a probabilidade de transição inversa é  $W_{\downarrow}$ , então podemos escrever

$$\frac{dN_+}{dt} = +N_- W_{\downarrow} - N_+ W_{\uparrow} \quad (2.7)$$

que em equilíbrio resulta

$$\frac{N_-}{N_+} = \frac{W_{\uparrow}}{W_{\downarrow}} \quad (2.8)$$

Aqui, as probabilidades de transição são diferentes pelo fato de a transição térmica requer não só um acoplamento, mas também outros sistemas em um estado de energia compatível a transição. Isto pode ser visto assumindo que o reservatório tem dois níveis cuja espaçamento entre eles é igual ao sistema nuclear, onde transições simultâneas conservam a energia, mas se ambos estiverem no nível mais alto da energia, a transição não é permitida, pelo o princípio da conservação da energia seria violado.

Se nós chamamos estados nucleares 1 e 2 com populações  $N_1$  e  $N_2$ , e os estados da rede  $a$  e  $b$  com populações  $N_a$  e  $N_b$ , o número de transições por segundo é

$$\text{número}/s = n/s = N_1 N_b W_{1b \rightarrow 2a} \quad (2.9)$$

onde  $W_{1b \rightarrow 2a}$  é a probabilidade de transição do núcleo entre o estado 1 e 2, e a rede entre o estado  $b$  e  $a$ . O estado de equilíbrio é dado pela igualdade das taxa de transição e sua taxa de transição inversa.

$$N_1 N_b W_{1a \rightarrow 2b} = N_2 N_a W_{2a \rightarrow 1b} \quad (2.10)$$

A teoria quântica exige que  $W_{1b \rightarrow 2a} = W_{2a \rightarrow 1b}$ . Em equilíbrio térmico temos então

$$\frac{N_1}{N_2} = \frac{N_a}{N_b}. \quad (2.11)$$

Os níveis nucleares têm a mesma população relativa dos níveis da rede, a população nuclear está em equilíbrio térmico com a rede. Pode-se calcular então

$$W_{\uparrow} = N_a W_{2a \rightarrow 1b} W_{\downarrow} = N_b W_{1b \rightarrow 2a} = N_b W_{2a \rightarrow 1b} \quad (2.12)$$

assim

$$\frac{dn}{dt} = N (W_{\downarrow} - W_{\uparrow}) - n (W_{\downarrow} + W_{\uparrow}) \quad (2.13)$$

re-escrevendo

$$\frac{dn}{dt} = \frac{n_0 - n}{T_1}$$

onde

$$n_0 = N \left( \frac{W_\downarrow - W_\uparrow}{W_\downarrow + W_\uparrow} \right) \quad \text{y} \quad \frac{1}{T_1} = (W_\downarrow + W_\uparrow). \quad (2.14)$$

Então a solução é

$$n = n_0 + A \exp \left\{ -\frac{t}{T_1} \right\} \quad (2.15)$$

onde  $A$  é uma constante de integração,  $n_0$  representa a diferença na população em equilíbrio térmico e  $T_1$  é um tempo característico de chegada ao equilíbrio chamado “Tempo de Relaxamento spin-rede”.

### 2.1.1 Efeitos dos Campos Magnéticos Dependentes do Tempo

Para estudar os efeitos do campo magnético  $B_x(t) = B_x \cos(\omega t)$  este é dividido em dois componentes, ambos com uma amplitude  $B_1$ , mas uma girando no sentido horário e no sentido anti-horário. Perto da ressonância pode ser demonstrado que o componente anti-horário não exerce influência qualquer sobre a amostra, portanto é desprezado. Em seguida, o campo pode ser escrito

$$\vec{B}_1 = B_1 \cos(\omega t) \hat{i} + B_1 \sin(\omega t) \hat{j}. \quad (2.16)$$

A equação que descreve o movimento de um spin em um campo magnético estático  $B_0$  e um campo magnético girante  $B_1$  é dado pela relação

$$\frac{d\vec{\mu}}{dt} = \vec{\mu} \times \gamma \left[ \vec{B}_0 + \vec{B}_1(t) \right]. \quad (2.17)$$

Usando um sistema de coordenadas girante em torno do eixo  $z$  a uma frequência  $\omega_z$  pode eliminar a dependência temporal do campo magnético  $B_1$ . A rotação em torno eixo  $z$  mantém independência do tempo del campo  $B_0$ . Se o eixo  $x$  é escolhido nas novas coordenadas do sistema de forma a coincidir com a direção de  $B_1$ , em seguida, a equação pode ser escrita como

$$\frac{\partial \mu}{\partial t} = \mu \times \vec{B}_{eff}$$

onde

$$\vec{\mathbf{B}}_{eff} = B_1 \hat{i} + \left( B_0 - \frac{\omega}{\gamma} \right) \hat{k}. \quad (2.18)$$

A magnetização no sistema girante está submetida a um campo magnético estático  $\mathbf{B}_{eff}$ . Então a magnetização mostra um movimento de precessão em um cone com um ângulo fixo em torno da direção  $\mathbf{B}_{eff}$  com uma frequência angular  $\gamma \mathbf{B}_{eff}$ .

### 2.1.2 Equações de Bloch

O comportamento da magnetização  $\mathbf{M}$  na presença de um campo magnético  $B_1(t)$  é expressamente escrito pelas equações de Bloch

$$\frac{d\vec{\mathbf{M}}}{dt} = \gamma \vec{\mathbf{M}} \times \vec{\mathbf{B}} - \frac{M_x \hat{i} + M_y \hat{j}}{T_2} - \frac{(M_z - M_0) \hat{k}}{T_1}, \quad (2.19)$$

onde  $M_0$  é o valor da magnetização ( $\mathbf{M}$ ) no equilíbrio térmico na presença apenas  $B_0$ . Os tempos característicos de dos processos de relaxamento  $T_1$  e  $T_2$  de um sistema de espins depois de ser perturbado a partir do seu estado de equilíbrio térmico. Agora se negligenciarmos o segundo eo terceiro termo em (2.19), porque estamos interessados apenas o comportamento de  $\mathbf{M}$  durante a aplicação do campo rf, podemos fazer isso porque a duração do pulso rf é curto em comparação com os tempos de relaxação  $T_1$  e  $T_2$ . As equações de Bloch ficam

$$\frac{d\vec{\mathbf{M}}}{dt} = \gamma \vec{\mathbf{M}} \times \vec{\mathbf{B}} \quad (2.20)$$

Em o sistema girante podemos escrever esta equação

$$\frac{\partial \vec{\mathbf{M}}_{rot}}{\partial t} = \gamma \vec{\mathbf{M}}_{rot} \times \vec{\mathbf{B}}_{eff} \quad (2.21)$$

onde  $\mathbf{B}_{eff}$  é dado pela relação (2.18) então a equação de Bloch em o sistema girante pode-se escrever

$$\frac{\partial \vec{\mathbf{M}}_{rot}}{\partial t} = \gamma \vec{\mathbf{M}}_{rot} \times \vec{\mathbf{B}}_{eff} - \frac{M_{x'} \hat{i}' + M_{y'} \hat{j}'}{T_2} - \frac{(M_{z'} - M_0) \hat{k}'}{T_1}, \quad (2.22)$$

### 2.1.3 Detecção de Sinal

Como é descrito acima, a colocação de uma amostra num campo magnético estático  $B_0$  e aplicar um campo magnético dependente do tempo  $B_1(t)$ , pode ser induzido uma magnetização em a amostra. Agora vamos ver como detectar esta magnetização usando princípios básicos.

A detecção da sinal em ressonância baseada-se na lei da indução electromagnética de Faraday e o princípio de reciprocidade. A lei de Faraday estipula que um fluxo de campo magnético dependente do tempo através de uma bobina receptora induz em ela uma força electromagnética (ou tensão) igual à taxa de variação do fluxo magnético através de la bobina. Aqui, a bobina receptora utilizada é o mesmo que a bobina de excitação. Assumindo que  $B_r(t)$  é o campo magnético do sistema de referência de laboratório em  $\mathbf{r}$ , produzido por um fluxo de corrente através da bobina, o fluxo magnético através da bobina produzido por  $\mathbf{M}(\mathbf{r}, t)$  é dado por

$$\varphi = \int B_r(t) \dot{M}(r, t) dr \quad (2.23)$$

Então de acordo com a lei da indução de Faraday a tensão induzida em a bobina serão

$$V(t) = -\frac{\partial \varphi(t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial t} \int B_r(t) \dot{M}(r, t) dr \quad (2.24)$$

Sendo esta a relação de base para a detecção de sinais em a RMN.

### 2.1.4 Geração de Pulsos RMN Base

Depois a publicação da obra *Spin Echoes* de Erwin Hahn em o ano 1950, seguido de uma série de investigações para encontrar os tempos de relaxação  $T_1$  e  $T_2$  principalmente através de um método de pulsos, deixando de lado o método de Onda Contínua usado no início da ressonância magnética nuclear. Entretanto Irving Lowe e Richard Norberg testaram o relacionamento entre o espectro de frequências e a FID (Free Induction Decay). J. W. Cooley e John Tukey desenvolvido um efici-

ente algoritmo para a transformação de Fourier. Final dos anos 60, Richar Ernst e Weston Anderson fizeram avanços importantes em RMN para a alta resolução.

Considera-se um grupo de spins inicialmente em equilíbrio térmico com um campo magnético estático  $B_0$  em a direção  $z$ . Primeiro analisa a situação negligenciando os tempos de relaxamento  $T_1$  e  $T_2$ .

Um campo magnético girante  $B_1$  é aplicado em  $t = 0$  com uma frequência  $\omega$  em ressonância com o campo  $B_0$ , o que é igual a ter  $\omega = \gamma B_0$ . Agora, o sistema é observado a partir de um sistema que gira com uma frequência  $\gamma B_0$  e em que  $B_1$  define a direção  $x$ . O pulso  $\pi/2$  é atingido ajustando apropriadamente a duração do pulso  $t_p$ , de tal modo que a magnetização consiga girar a partir da sua posição inicial em  $z$  até que fique orientado para a direção ao longo do eixo  $y$ . No caso que não existam inomogeneidades em o campo  $B_0$ , todos os spins em a amostra precessariam na frequência  $\gamma B_0$ , isso é, no sistema girante a magnetização em toda a amostra seria orientada na direção  $y$ . Mas a presença de inomogeneidades do campo  $H_0$  em a amostra leva na existência de um desfasagem de frequências da precessão em os spins em amostra. Agora, se consideramos uma pequena parte da amostra, em um intervalo de tempo  $\tau$ , a magnetização manter-se-á em no plano  $x - y$ , onde desprezamos no tempo de relaxamento longitudinal  $T_1$ , mas terá mudado a direção  $\delta M$  com respeito ao eixo e um ângulo  $\theta$  dado pela relação

$$\theta = \gamma (\delta B) \tau \quad (2.25)$$

onde  $\delta B = B - B_0$  representando a inomogeneidade em o campo  $B$ . Agora pode-se obter de volta a magnetização inicial usando um segundo pulso para alinhar a magnetização em no eixo  $y$  novamente, a este “novo enfoque” de a magnetização chamam *eco de spin* ou *Eco de Hahn*. A sequência de pulsos pode-se escrever como  $\pi/2 - \tau - \pi$ , isto é, se aplicarmos um pulso  $\pi/2$  em no eixo  $x$ , logo de um tempo  $\tau$  aplicarmos um pulso  $\pi$ , vale notar, que a duração nestes pulsos é negligenciável. Na figura.(2.1) mostra que depois do segundo pulso, a magnetização  $\delta M$  avançará na mesma direção e retornará ao eixo  $y$ , independentemente do  $\theta$ , em um tempo

$2\tau$ . Depois a sinal diminuirá novamente por causa da falta de homogeneidade do campo.

Agora se considerarmos os efeitos dos tempos  $T_1$  e  $T_2$ , depois do primeiro pulso da componente do eixo  $z$  cresce com um tempo característico  $T_1$ , o pulso  $\pi$  invertendo assim a componente  $z$  que foram desenvolvidos, por conseguinte não contribui à componente  $\delta M$  localizado em no plano  $xy$ . Durante o intervalo  $\tau$  a magnetização em o plano  $xy$  diminuirá com um tempo de relaxação  $T_2$ , o tamanho da magnetização que produz o *eco* é

$$M(t) = M_0 e^{-\frac{2\tau}{T_2}} \quad (2.26)$$

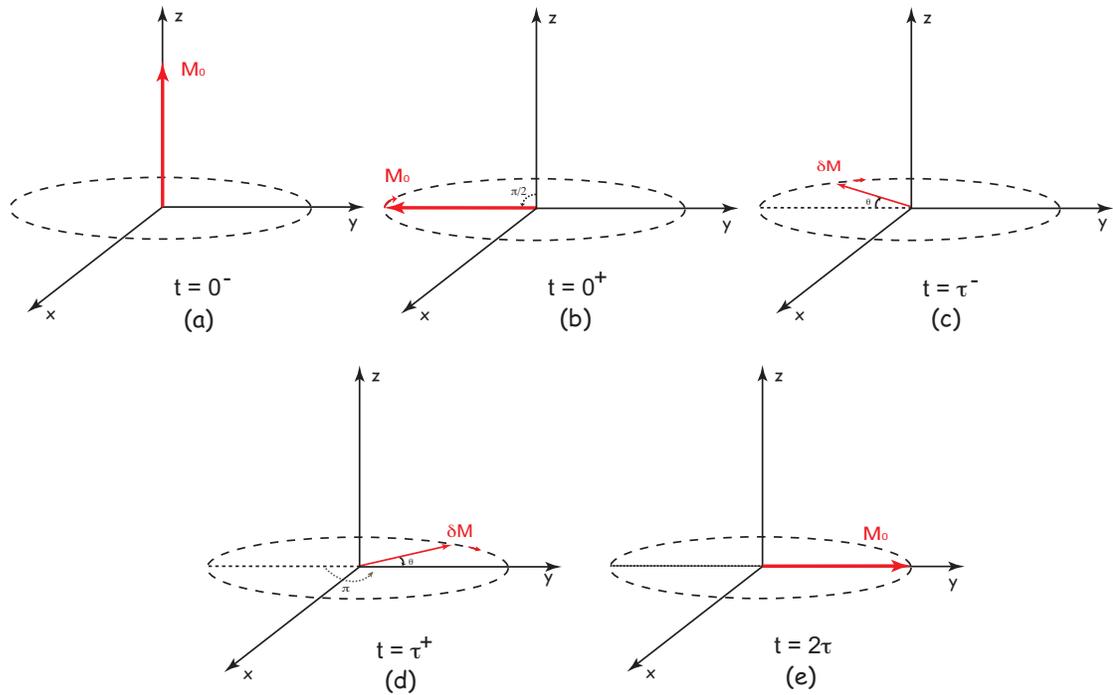


Figura 2.1: Diagrama que ilustra mais visivelmente a formação do *eco* de spin.

### 2.1.5 Ecos de Gradiente

Frequentemente em IRM é usada outra forma de sinal de eco de spin que é formada por os campos do gradiente de magnético dependentes do tempo [13,15,16]. Começando primeiro definindo o campo do gradiente.

Um campo de gradiente  $\mathbf{B}_G$ , é um campo não homogêneo cuja componente  $z$  vai mudando ao longo de uma direção chamada *direção de gradiente*, usando uma variação lineal do campo, isso é

$$B_{G,z} = G_x x + G_y y + G_z z \quad (2.27)$$

Em consequência

$$\vec{B} = (B_0 + G_x x + G_y y + G_z z) \hat{k} \quad (2.28)$$

A sequência de os pulsos pode ser representado como se segue. Se depois da aplicação de um pulso  $\alpha$ , surge um gradiente negativo, os spins em diferentes posições de  $x$  ganham diferentes fases, que podem ser escritas em o mesmo sistema girante como

$$\begin{aligned} \varphi(x, t) &= \gamma \int (-G_x) x dt & 0 \leq t \leq \tau \\ &= -\gamma G_x x t \end{aligned} \quad (2.29)$$

À medida que o tempo passa, a perda da coerência de fase de spin é aumentado. A sinal decai com um tempo  $T_2^*$ . Agora aplicamos um gradiente igual em magnitude mas positivo, as componentes transversais começaram um realinhamento, o ângulo de fase em o sistema girante é

$$\begin{aligned} \varphi(x, t) &= -\gamma G_x x t + \gamma \int G_x x dt & \tau \leq t \leq 2\tau \\ &= -\gamma G_x x t + \gamma G_x x (t - \tau) \end{aligned} \quad (2.30)$$

Depois de um tempo  $\tau$  os spins se concentram novamente para formar uma sinal de *eco*.

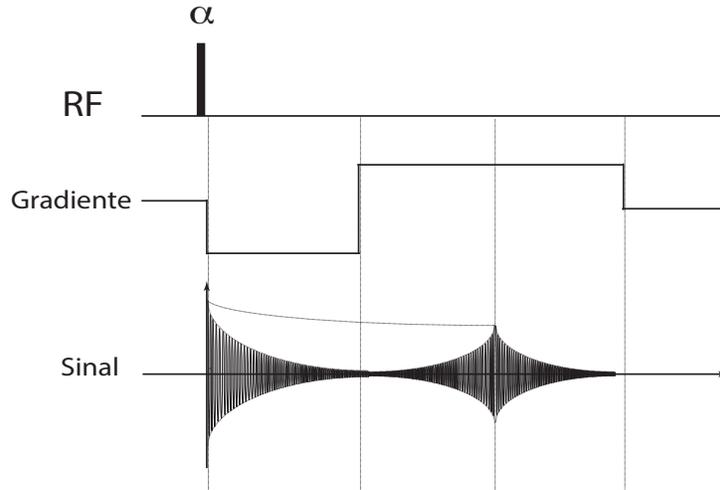


Figura 2.2: Sequência de pulsos Gradiente-*Eco*. Depois da aplicação de um pulso para criar uma inclinação pequena ao ângulo, o gradiente negativo em  $x$  leva um desfaseamento dos spins.

### 2.1.6 Sequências de Pulsos Inversão Recuperação (IR)

É uma variação das sequências de *eco* de spin, sendo similar entre elas, só que esta aumenta um pulso inicial de 180 graus antes da sequência *eco* de spin. Neste pulso inicial de 180° é conhecido como pulso de inversão o que implica um parâmetro adicional conhecido como tempo de inversão (TI), que é usado para inverter (reverter) ou anular seletivamente a sinal de algum tecido [15, 16]. Devido às variações em no tempo de relaxação  $T_1$  no contraste na imagem pode-se manipular usando um pulso de inversão na qual vira a magnetização longitudinal desde no eixo  $+z$  até no eixo  $-z$  (veja a fig.2.3). Antes de aplicar a sequência de pulsos de excitação rf posterior, é necessário proporcionar um tempo de retardo “delay” para permitir que a magnetização invertida poda retornar para no valor de equilíbrio (isso é desde no eixo  $-z$  até no eixo  $+z$ ). As sequências de pulsos com um pulso de inversão, seguido de um tempo de atraso antes de uma excitação rf é conhecido como sequên-

cia pulsos de recuperação da inversão pelas siglas inglesas IR (Inversion Recovery). No tempo de retardo entre a inversão e a excitação é chamado tempo de inversão (denotado por TI).

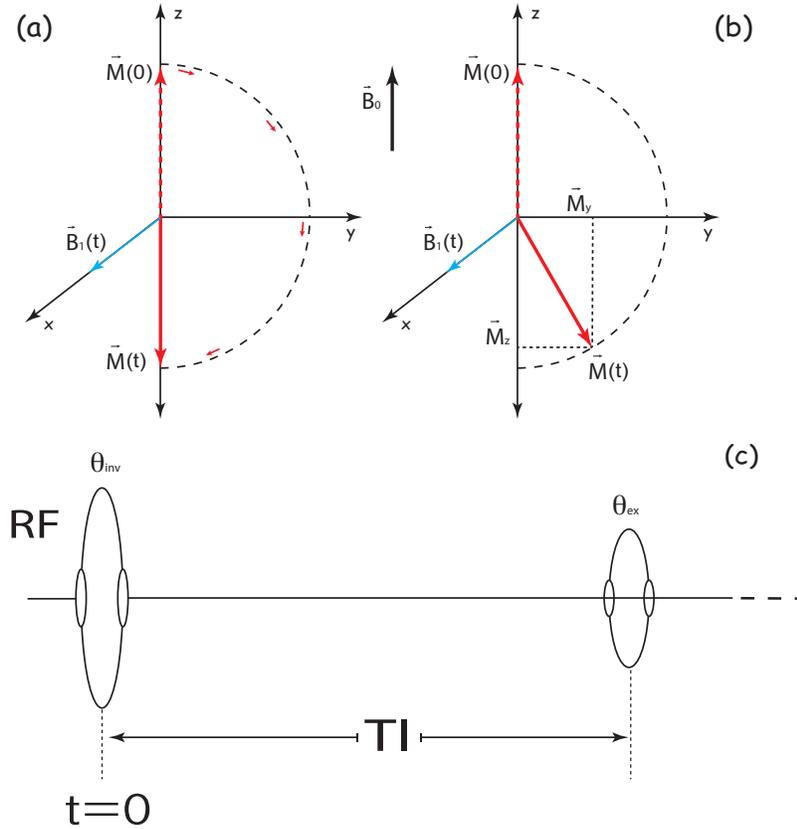


Figura 2.3: Evolução temporal da magnetização em ressonância durante um pulso de inversão. O vector da magnetização inicial  $\vec{M}(0)$  está alinhado com o campo magnético  $\vec{B}_0$  ao longo do eixo- $z$ . No pulso RF de inversão  $\vec{B}_1$  aplicado ao longo do eixo- $x$  gira no vector magnetização no plano  $yz$  em torno a  $x$ . (a) No final do pulso em no tempo  $t$ , a magnetização  $\vec{M}(t)$  está alinhado ao longo do eixo- $z$  negativo, sempre que o ângulo de inclinação seja  $180^\circ$ . (b) Quando o ângulo de inclinação se afasta de  $180^\circ$ , e a inversão não é total e se produz a magnetização transversal  $\vec{M}_y$ . (c) Uma sequência de pulsos IR, que consistindo de um módulo de IR e uma sequência de pulsos agrupados, separados pelo tempo da inversão (TI).  $\theta_{inv}$  e  $\theta_{ex}$  são os ângulos dos pulsos RF da inversão e a excitação, respectivamente.

## 2.2 Relaxação em o Sistema Girante

A técnica da relaxação em o sistema girante permite obter informação da magnitude dos campos locais residuais em materiais com algum grau de organização molecular [5], como são os sólidos e os sistemas biológicos em general. Tendo em conta que o campo local residual no valor do campo em a posição de um spin nuclear determinada, devido às contribuições não ponderadas (devido à presença da dinâmica molecular) de todos os spins da amostra. Para essas amostras pode-se diferenciar dois casos.

### Caso I: Campos Locais Negligenciáveis em comparação com $\mathbf{B}_1$

A técnica consiste fundamentalmente no *spin-lock* (ou travamento dos spins). A amostra são colocados em um campo magnético externo  $\mathbf{B}_0$ . Depois de um tempo em na ordem ou superior a  $3T_1$ , temos uma magnetização macroscópica  $M_0$  em paralelo com  $\mathbf{B}_0$  como se ilustra na fig.2.4a. Depois se aplica um pulso de  $\pi/2$  em a direção  $x$  em o sistema girante, onde a magnetização gira para o plano  $xy$ , ilustrada na fig.2.4b.

Seguidamente depois do pulso, em o sistema de laboratório a magnetização precessiona neste plano, enquanto no sistema girante está fixada ao longo da direção  $y$ , ilustrado na fig.2.4c. Se a fase da rf é trocada por  $90^\circ$ , o campo  $\mathbf{B}_1$  gira e é mantida ao longo da magnetização em o sistema girante ilustrado na fig.2.4d.

Então, quando a rf é aplicada exatamente em ressonância, a magnetização no sistema girante apenas experimenta a presença do campo  $\mathbf{B}_1$ . Consequentemente, o campo  $\mathbf{B}_1$  em o sistema girante agora seria o análogo ao campo  $\mathbf{B}_0$  em o sistema de laboratório, e a magnetização se diz que esta ancorado a campo  $\mathbf{B}_1$ . Logo, relaxa um valor do equilíbrio com uma constante  $T_{1\rho}$ , mostrado na fig.2.4e. A medição é realizada quando corta o pulso *lock* e monitora a queda livre da indução (FID) resultante, como se ilustra na fig.2.4.

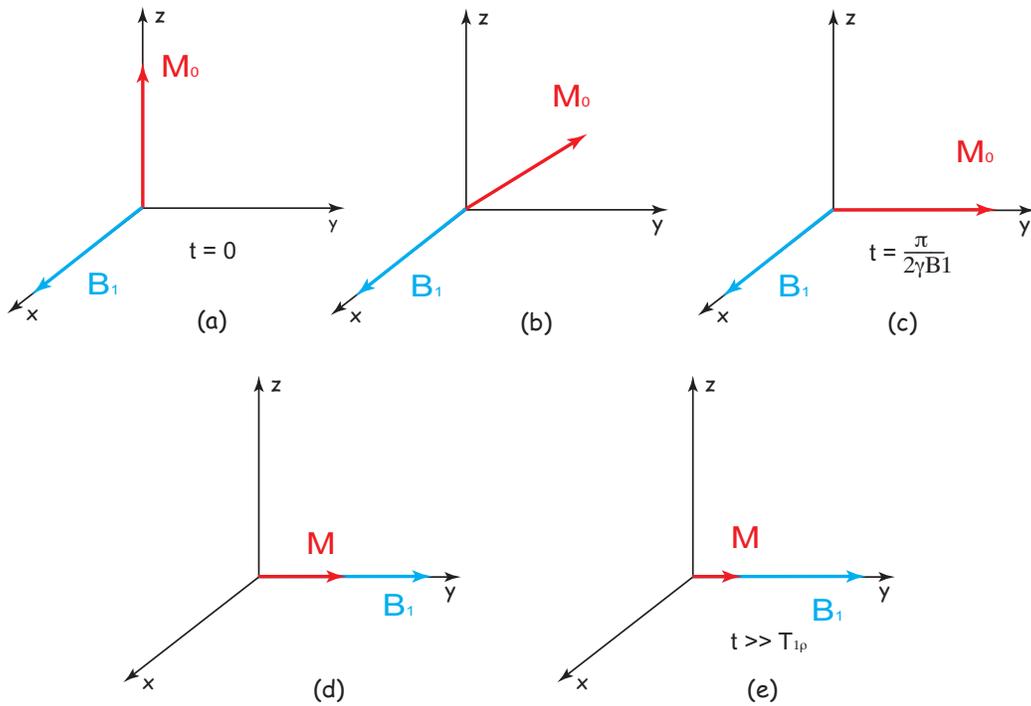


Figura 2.4: Comportamento da magnetização em o sistema girante durante uma experiência de *spin lock* em ressonância. Neste caso o campo de rf é aplicado em ressonância e os campos locais são negligenciáveis em comparação com a intensidade de comparada  $B_1$ .

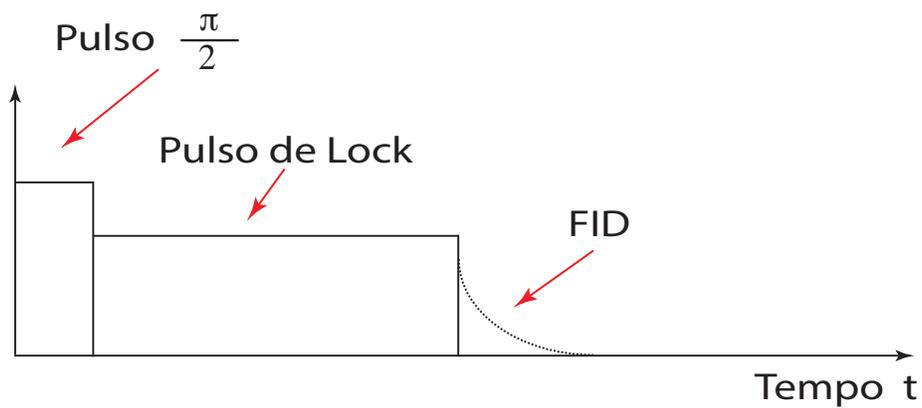


Figura 2.5: Sequência de pulsos *spin-Lock*.

## Caso II: Campos Locais do mesmo ordem de magnitude que $B_1$

Em no caso de ter uma componente  $z$  de os campos locais comparáveis em intensidade com  $B_1$ , então temos uma situação diferente. Os primeiros passos no experimento até que o campo rf seja desligado temos os mesmos apresentados em caso I (fig.2.2a-d). Portanto, o caso I diferencia-se depois de desligar o pulso rf, a magnetização precessarão em torno do campo efetivo  $B_{eff}$ , o qual é a soma de  $B_1$  e  $B_{Lz}$  (componente do campo local em a direção  $z$ ), em no caso de estar em ressonância (2.2). Por conseguinte, depois de um tempo  $T_{2\rho}$ . A fim de obter informação da dispersão em a magnetização devido aos campos locais, se mede a intensidade da sinal de RMN em função da amplitude do campo  $B_1$  em um tempo fixo de *lock*.

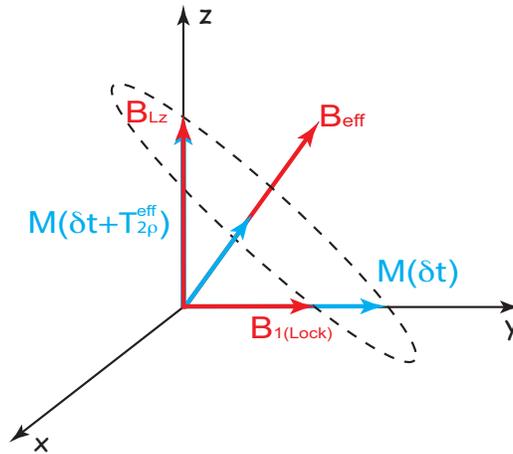


Figura 2.6: Sequência de pulsos Gradiente-*Eco*. Depois da aplicação de um pulso para criar uma inclinação pequena ao ângulo, o gradiente negativo em  $x$  leva um desfaseamento dos spins.

## 2.3 Geração de Imagens

### 2.3.1 Codificação do Espaço

Se aplicamos um gradiente de campo magnético conforme descrito anteriormente, a saber, um campo magnético que tem uma magnitude variante linearmente com a

posição, então a frequência de Larmor será também uma função linear. Se no campo muda linearmente ao longo da direção  $z$ , então temos

$$\omega(z) = \omega_z + \gamma G_z z \quad (2.31)$$

Esta situação mostra-nos que a frequência é codificada espacialmente e cada uma das partes da amostra tem spins que precessam a uma frequência diferente dependendo da posição  $z$ . A FID gerada em um intervalo infinitesimal  $dz$  em o ponto  $z$ , omitindo a relaxação transversal é

$$dS(z, t) \propto \rho(z) dz \exp \{-i\gamma (B_0 + G_z z) t\} \quad (2.32)$$

a contante de proporcionalidade depende no ângulo de inclinação da magnetização em relação ao  $xy$ , e a intensidade de  $\mathbf{B}_0$  entre outras coisas. Por conveniência em a notação será ignorada a constante de proporcionalidade. O sinal em a equação anterior diz que está codificada em frequência, já que a frequência está relacionada linearmente com a localização espacial. Pela mesma razão  $G_z$  é chamado gradiente de codificação de frequência. Na figura (2.6) pode-se observar esta relação. Obtendo a sinal do objeto  $S(t)$ .

$$\begin{aligned} S(t) &= \int dS(z, t) \\ &= \int \rho(z) \exp \{-i\gamma (B_0 + G_z z) t\} dz \end{aligned} \quad (2.33)$$

### 2.3.2 Imagem Unidimensional

Uma imagem unidimensional pode ser obtida de dois tipos: uma é por intermédio de projeção unidimensional do objeto em sua totalidade sobre uma direção particular, ou obter uma linha de imagem. Só considerando no primeiro caso. Con-

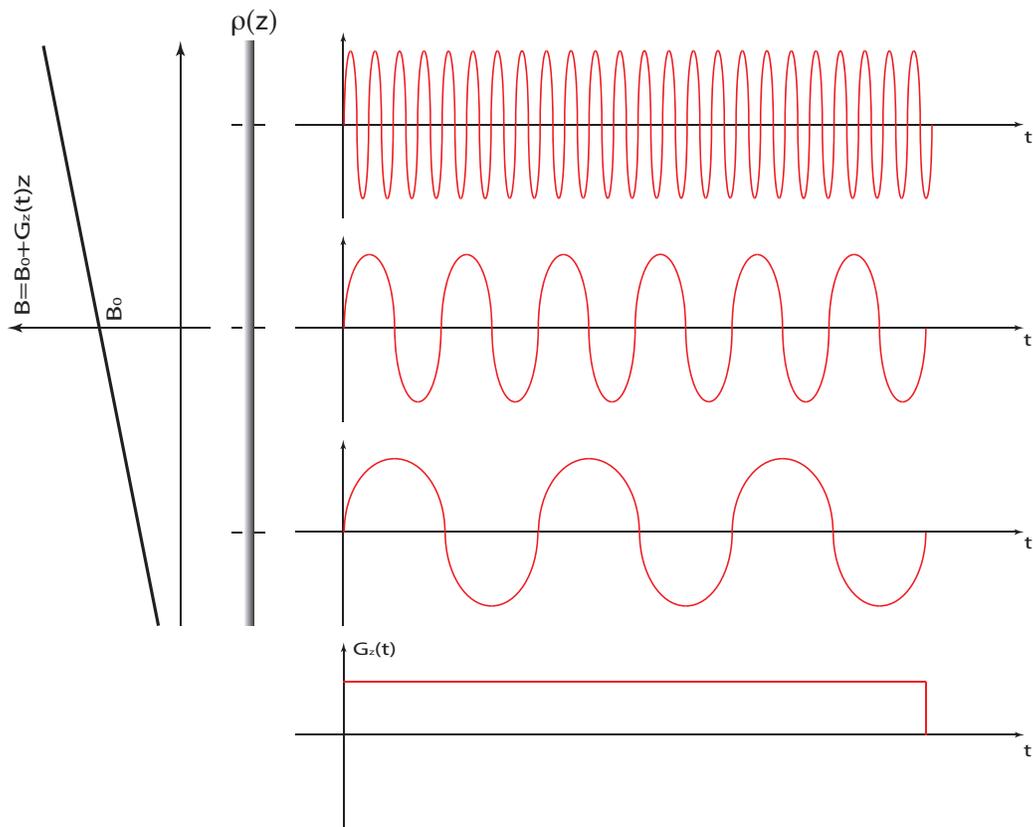


Figura 2.7: Sinais unidimensionais localizados de um objeto hipotético em na presença de um gradiente com frequência-codificada.

sideremos a projeção sobre o eixo  $z$ . A função Imagem que desejamos obter  $I(z)$  que pode ser descrita

$$I(z) = \iint \rho(x, y, z) dx dy \quad (2.34)$$

Na figura (2.7) temos uma sequência de imagem com *eco* de spin. Depois do segundo pulso é adquirido a sinal em na presença de um gradiente de codificação em frequência  $G_z$ . Então a sinal pode ser expressada em na forma

$$\begin{aligned} S(t) &= \iiint \rho(x, y, z) e^{-i\gamma G_z(t-T_E)} dx dy dz \\ &= \int I(z) e^{-i\gamma G_z(t-T_E)} dz \end{aligned} \quad (2.35)$$

para  $|t - T_E| < T_{adq}/2$ . Se definirmos  $k_z = \gamma G_z(t - T_E)/2\pi$  então pode ser escrita

$$S(t) = \int I(z) e^{-2\pi i k_z z} dz \quad (2.36)$$

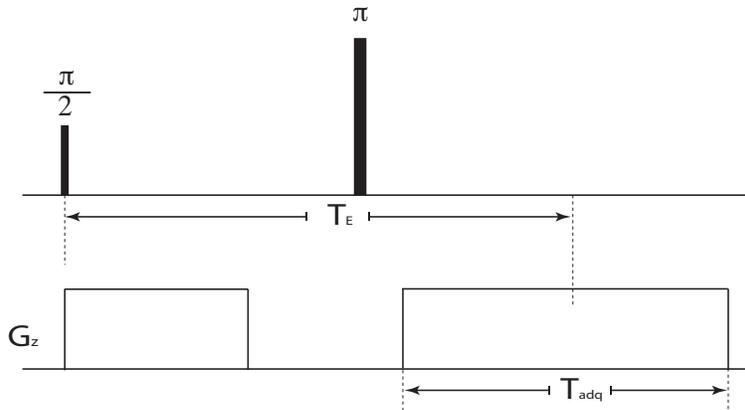


Figura 2.8: Sinais unidimensionais localizados de um objeto hipotético em na presença de um gradiente com frequência-codificada.

A equação (2.36) é considerada como a imagem unidimensional. Pode ser visto a partir dessa equação que quando utilizam-se gradientes lineares, a sinal  $s(k)$  é a transformada de Fourier da densidade de spins da amostra.

O fato de que a sinal e a densidade de spins estejam relacionadas por uma transformada de Fourier é uma grande vantagem para a IRM. Uma das propriedades mais importantes da transformada é sua inversa bem definida. Dada  $s(k)$  para toda  $k$ , a densidade de spins da amostra pode ser encontrada tomando-se a transformada de Fourier inversa da sinal.

$$I(z) = \mathcal{I}(S(k_z)) \quad (2.37)$$

É importante notar que pode-se escolher qualquer direção em o caso unidimensional.

## 2.4 Contraste

Um objetivo importante para as imagens é poder distinguir diferentes tipos de regiões na amostra. Se o método das imagens não tiver um mecanismo de manipulação da sinal que produz diferentes sinais para as diferentes regiões, distinguir entre dois regiões seria impossível. Porém felizmente a IRM tem diversos mecanismos da manipulação em que a sinal depende dos diferentes parâmetros, produzindo vários mecanismos de contraste. Os mecanismos de contraste mais básicos são baseados em a densidade de spins, e diferenças de  $T_1$  e  $T_2$  entre diferentes regiões. O tempo de relaxação da rede de spin  $T_1$ , isto significa que os movimentos moleculares em a faixa da frequência de ressonância  $\omega_0$ . Por outro lado, o tempo de relaxação spin-spin  $T_2$ , reflete as flutuações moleculares para frequências menores como as correspondentes dos campos locais produzidos por as interações entre os spins [5, 12, 13, 17].

Estudos anteriores demonstraram que parâmetros representando os movimentos lentos são mais indicados para imagens das propriedades dos tecidos porque o estado das proteínas e membranas é crucial em os processos celulares. Neste caso, resulta

mais apropriado utilizar como contraste da relaxação transversal. O problema deve ser aqui relacionado com decaimentos multi-exponenciais, por conseguinte, devem ser definidas muito claramente as condições das imagens para poder obter resultados significativos.

Outra forma de aumentar o contraste entre tecidos é utilizando agentes paramagnéticos. As concentrações devem ser as menores possíveis, com o fim de evitar qualquer tipo de efeitos secundários [12, 13]. Mas sabe-se que os agentes paramagnéticos atuam melhor aos campos magnéticos baixos.

Recentemente foi também sugerido utilizar a terceira espécie da relaxação em RMN, a relaxação de spin-rede em o sistema girante,  $T_{1\rho}$  representa a constante do tempo de decaimento da magnetização transversal que acontece durante a aplicação de um pulso de lock, de amplitude  $\mathbf{B}_{s1}$ , alinhado com o vetor da magnetização efetiva. Foram efetuados numerosos estudos sobre tecidos biológicos e comprovou-se a sensibilidade aos processos físico-químico que ocorrem a baixas frequências de interação (em torno de 0,1-100kHz) [16].

## Capítulo 3

# Método Geométrico de Controle Ótimo e o Problema de Saturação de Magnetização

Um das áreas mais ativas em Ressonância Magnética Nuclear (RMN) atualmente tem sido aquele envolvendo a sintetização de sequências de pulso otimizadas para uma tarefa específica [18, 19]. Neste domínio, as técnicas de controle ótimo podem ser utilizadas para desenhar campos magnéticos (controles) que são aplicados externamente com o objetivo de controle. As aplicações se estendem da computação quântica com a otimização temporal de operações quânticas, passando por espectroscopia, e imageamento [20, 21]. Neste contexto, os procedimentos de otimização numérica, como o algoritmo GRAPE (Gradient Ascent Pulse Engineering Algorithm), foram implementados com sucesso [22, 23]. Atualmente, os métodos da teoria de controle ótimo geométrico também tem sido implementados com êxito [24–27]. Com respeito a otimizações temporais, o método geométrico permite que evoluções temporais das trajetórias possam ser mapeadas ao problema da obtenção das menores distâncias (geodésicas) separando pontos no espaço de fase. No caso de spins esse espaço é, para o caso de spin  $1/2$ , a esfera de Bloch. Por seu caráter analítico,

o método geométrico tem atraído enorme atenção da comunidade e por isso será abordado aqui.

Primeiramente faremos uma revisão de resultados disponíveis na literatura sobre o problema de controle temporal ótimo objetivando manipular um sistema de dois níveis na presença de dissipação. Apesar do método possuir aplicabilidade geral, o foco de nossa revisão será com respeito a trajetórias com estado inicial e final específicos do processo de saturação no qual a magnetização inicial é máxima, e final é mínima, Além disso, para facilitar a análise, os controles externos das trajetórias serão de modo a manter as trajetórias no espaço bidimensional. Além da importância prática, esse problema apresenta solução analítica explícita e servirá para apresentar o método de otimização geométrica de Pontryagin.

A abordagem geométrica é baseada em ferramentas matemáticas que vêm da geometria diferencial e dinâmica hamiltoniana [8, 26]. Uma solução completa do controle ótimo de sistemas quânticos dissipativos de dois níveis cuja dinâmica é regida pelas equações de Kossakowsky-Lindblad foi apresentada nas referências [28, 29]. Apesar de simples, o modelo contém tipos de trajetória não triviais, chamadas singulares, que garantem a obtenção de um mínimo absoluto para o tempo ótimo. A existência desse tipo de soluções singulares tem ganhado importância na literatura de controle quântico [27].

Apesar de existirem em vários cenários de aplicação, nossa ênfase será para sistemas de spin  $1/2$  no contexto de RMN onde são considerados os tempos de relação transversal  $T_2$  e longitudinal  $T_1$  [25, 30, 31]. Nossa abordagem pretende ser o mais clara possível e, apesar de utilizar resultados matemáticos rigorosos, não insistirá nos detalhes de demonstrações.

Além da revisão da literatura sobre o método geométrico vamos sugerir uma modificação do método que consiste em substituir a etapa numérica de solução das equações de Bloch por soluções analíticas obtidas por um método introduzido por Bain [32]. Agora com um método completamente analítico de solução ótima, iremos analisar as limitações do método com respeito a mudanças nas variáveis de controle como também dos tempos de relaxação característicos.

## 3.1 Teoria de Controle Ótimo

A solução do problema de controle ótimo foi obtido de forma muito geral por L. Pontryagin e os seus colaboradores [7, 8] e é conhecida como princípio do máximo de Pontryagin (PMP).

### 3.1.1 Princípio do Máximo de Pontryagin

**Teorema 2.1** Princípio do Máximo de Pontryagin (PMP)

A curva  $\eta(t) = (q(t), u(t))$ ,  $t \in [0, T]$ , é absolutamente contínua, e é uma trajetória ótima se existe uma variação de  $q(t)$  no espaço de coestados (isso é que para cada ponto das coordenadas  $q$  temos respectivo ponto em o espaço dos momentos  $p$ ),  $(q(t), p(t))$ , de maneira que satisfaça as equações de movimento de Hamilton,

$$\dot{q}^i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q^i}, \quad (3.1)$$

onde  $i$  depende do número de coordenadas, tal modo que

$$H(q(t), p(t), v) = \max_u H(q(t), p(t), u(t)) \quad t \in [0, T], \quad (3.2)$$

onde  $H$  é a função hamiltoniana

$$H(x, p, u) = p_i f^i(q, u) - L(q, u), \quad (3.3)$$

onde  $f^i$  é dado pela eq. (1.3).

O princípio do máximo de Pontryagin tem sido aplicado com êxito em uma grande variedade de problemas. Um exemplo significativo do seu uso consiste nas chamadas soluções “*bang-bang*” no problema de controle ótimo quando os controles são “*limitados*”. Por razões físicas, tecnológicas e econômicas, se impõem restrições

a priori sobre os controles do tipo  $|u| < u_{\max}$ . Se a equação de estados é linear nos controles então o sistema pode ser escrito usando (1.3) e levamos da forma

$$\dot{q}^i = f^i(q, u) = F_0^i(q) + F_a^i(q) u_a \quad (3.4)$$

onde  $i = 1, \dots, n$  é o número de equações do sistema e o funcional a minimizar (eq.(1.4)), sera a função de algumas das variáveis do estado ou uma função delas, mas não dos controles  $u_a$  :

$$S = \int_0^T L(q, u) dt, \quad (3.5)$$

onde para  $S$  mínimo vamos a cai para (3.2) o hamiltoniano de Pontryagin é  $H(q, p, u) = p_i F_0^i + p_i F_a^i u_a - L(q, u)$ , pelo que para  $(q, p)$  fixos o máximo de  $H$  se alcança somente em no extremo do domínio de definição dos controles. Se temos apenas um controle  $u$ , o máximo de  $H$  ocorre quando  $u(t) = u_{\max}$ , se  $p_i f^i(x) > 0$ ; e quando  $u(t) = u_{\min}$ , se  $p_i f^i(x) < 0$ . Assim, poderemos desenvolver uma estratégia ótima dependendo do valor no sinal da função  $\Phi = p_i f^i(x)$ , chamada na literatura por este motivo de função “switching”, e que consiste, no específico, na escolha os valores de  $u$ , da forma:

$$u(t) = \begin{cases} u_{\max} & \text{se } \Phi(x, p) > 0 \\ u_{\min} & \text{se } \Phi(x, p) < 0. \end{cases} \quad (3.6)$$

Se partimos de um ponto  $(x_0, p_0)$  em  $t = 0$  tal que  $\Phi(x, p) > 0$ , a estratégia ótima consiste em resolver as equações de Hamilton:

$$\dot{q}^i = F_0^i(q) + F_1^i(q) u_{\max} \quad (3.7)$$

$$\dot{p}_i = -p_j \frac{\partial F_0^j}{\partial q^i} - p_j \frac{\partial F_1^j}{\partial q^i} u_{\max} - \frac{\partial L}{\partial q^i}(x, u). \quad (3.8)$$

Avançamos pela trajetória  $(q(t), p(t))$  resultante até que  $q(T) = q_T$  ou até que  $\Phi(q(t), p(t))$  mude de sinal. Se acontece o segundo caso, a partir desse momento seguimos a trajetória  $(\tilde{q}(t), \tilde{p}(t))$  cujas equações de Hamilton são:

$$\begin{aligned}\dot{q}^i &= F_0^i(q) + F_1^i(q) u_{\min} \\ \dot{p}_i &= -p_j \frac{\partial F_0^j}{\partial q^i} - p_j \frac{\partial F_1^j}{\partial q^i} u_{\min} - \frac{\partial L}{\partial q^i}(q).\end{aligned}$$

Se eventualmente  $\tilde{q}(T) = q_T$ , então podemos afirmar que o problema foi resolvido, mas se  $\Phi(t)$  volta a mudar de sinal então novamente voltamos para as equações (3.7-3.8) e assim sucessivamente.

Pode acontecer que seguindo com esta estratégia  $\tilde{q}(T) \neq q_T$ , e o problema de controle ótimo não tenha solução para nenhum valor inicial  $(q_0, p_0)$ . Então esta estratégia poderia ser alterada permitindo que  $(q(t), p(t))$  estejam contidos no conjunto  $\Phi = 0$  durante um certo intervalo de tempo, definindo o que é denominado “*arco singular*”.

Como o PMP não prevê o caso  $\Phi = 0$ . Então temos que usar outra definição para poder solucionar o problema onde  $\Phi = 0$ , e os casos com sinal positivo e negativo. Para isso, usamos uma definição que resolve o problema quando o switching contemple no caso onde seja igual a zero, esta em a literatura é chamada *problema de controle do tempo mínimo*.

### 3.1.2 Problema de Controle do Tempo Mínimo

O conjunto das definições expressadas seguidamente estão contidas em [8].

**Definição:** Consideremos o problema de controle mínimo de tempo de entrada única em um sistema de controle afins

$$\dot{\vec{q}}(t) = \vec{F}_0(q(t)) + u(t) \vec{F}_1(q(t)),$$

com  $q(t) \in \mathfrak{R}^n$ , tal que  $|u(t)| \leq 1$  onde  $\vec{F}_0, \vec{F}_1$  são campos vectoriais infinitamente diferenciáveis. Seja o hamiltoniano  $H(\vec{q}, \vec{p}, u) = \langle \vec{p}, \vec{F}_0(q) + u\vec{F}_1(q) \rangle$ , onde  $\vec{p} \neq 0$  e  $\langle \cdot \rangle$  é o produto escalar. Um extremo é uma solução das equações do princípio máximo:

$$\dot{\vec{q}} = \frac{\partial H}{\partial \vec{p}}(\vec{q}(t), \vec{p}(t), u(t)), \quad \dot{\vec{p}} = -\frac{\partial H}{\partial \vec{q}}(\vec{q}(t), \vec{p}(t), u(t)), \quad (3.9)$$

então

$$H(\vec{q}(t), \vec{p}(t), v) = \max_{|u| \leq 1} H(\vec{q}(t), \vec{p}(t), u(t)). \quad (3.10)$$

Porém para este caso temos as seguintes condições:

Um extremo que é definido em  $[0, T]$  é chamado regular se para todo  $t \in [0, T]$ , temos

$$u(t) = \text{sing}(\Phi(t)),$$

onde  $\Phi(t) = \langle \vec{p}(t), \vec{F}_1(\vec{q}(t)) \rangle$ . Este é chamado controle “*bang-bang*” se  $u(t)$  é constante e definido por partes cujos valores são  $\{-1, +1\}$ . E chamamos “*singular*” se para um  $t \in [0, T]$ , temos  $\Phi = 0$ .

A pergunta que segue é, como determinar os extremos singulares? Para isso usamos os seguintes resultados:

### 3.1.3 Determinação dos Extremos Singulares

Seja o ponto  $(\zeta, u)$ , onde  $\zeta = (q, p)$  é um extremo singular definido em  $[0, T]$ . Então, pelos resultados (3.9) temos:

$$\dot{\vec{q}}(t) = \vec{F}_0(q(t)) + u(t)\vec{F}_1(q(t)), \quad \dot{\vec{p}} = -\vec{p}(t) \cdot \left( \frac{\partial \vec{F}_0}{\partial q}(q(t)) + u(t) \frac{\partial \vec{F}_1}{\partial q}(q(t)) \right)$$

como está conteúdo para cada  $t$  em o conjunto

$$\Sigma_1 : \left\{ (q, p) ; \langle \vec{p}(t), \vec{F}_1(q(t)) \rangle = 0 \right\}.$$

Desde  $t \rightarrow \zeta(t)$  é uma curva estritamente contínua em  $\Sigma_1$ , perfeitamente diferenciável em  $t \rightarrow \langle \vec{p}(t), \vec{F}_1(q(t)) \rangle = 0$  se tem

$$\langle \vec{p}(t), [\vec{F}_1, \vec{F}_0](q(t)) \rangle = 0$$

em  $[0, T]$ , onde os brackets de Lie são calculados usando a convenção

$$[Z_1, Z_2](x) = \frac{\partial Z_1}{\partial x}(x) Z_2(x) - \frac{\partial Z_2}{\partial x}(x) Z_1(x). \quad (3.11)$$

Desde  $t \rightarrow (q(t), p(t))$  é contínua, e a curva  $t \rightarrow \zeta(t)$  está incluída par cada  $t \in [0, T]$  no conjunto

$$\Sigma_2 : \left\{ (q, p) \in \Sigma_1 ; \langle \vec{p}, [\vec{F}_1, \vec{F}_0](q) \rangle = 0 \right\}.$$

Portanto diferenciando  $t \rightarrow \langle \vec{p}(t), [\vec{F}_1, \vec{F}_0](q(t)) \rangle = 0$ , obtemos a relação

$$\langle \vec{p}(t), [[\vec{F}_1, \vec{F}_0], \vec{F}_0] \rangle + u(t) \langle \vec{p}(t), [[\vec{F}_1, \vec{F}_0], \vec{F}_1] \rangle = 0, \quad (3.12)$$

para quase todo  $t \in [0, T]$ . Esta última relação permite-nos calcular em muitos casos o valor do controle  $u(\cdot)$  em forma explicita.

## 3.2 Desenvolvimento do Modelo

Usando as equações de Kossakowsky-Lindblad [28, 29, 33] que descrevem a evolução de um sistema quântico dissipativo de dois níveis cuja dinâmica é regida por o sistema

$$\begin{aligned}
\frac{dx}{dt} &= -\Gamma x + u_2 z \\
\frac{dy}{dt} &= -\Gamma y - u_1 z \\
\frac{dz}{dt} &= \gamma_- - \gamma_+ z + u_1 y - u_2 x,
\end{aligned} \tag{3.13}$$

onde a variável de estado  $q = (x, y, z)$  pertence à esfera de Bloch  $|q| \leq 1$  que é invariante para a dinâmica já que os parâmetros dissipativos  $\Lambda = (\Gamma, \gamma_+, \gamma_-)$  satisfazem  $|\gamma_-| \leq \gamma_+ \leq 2\Gamma$ .

O campo de controle é  $u = u_1 + iu_2$ . O problema de controle ótimo básico consiste em minimizar o tempo da transferência de um salto em o módulo de controle ou reduzir ao mínimo a transferência da energia  $\int_0^T |u|^2 dt$  com um controle de duração fixa.

Com as eqs.(3.13) são modeladas o controle de uma molécula em um ambiente dissipativo usando como campo um laser [29], mas também é possível usar em Ressonância Magnética Nuclear (RMN), onde a dinâmica de uma partícula de spin 1/2 pode ser descrita, até renormalizar as equações de Bloch da forma (3.13) restringindo  $\gamma_+ = \gamma_-$  [20, 21, 24]. Isso implica que neste modelo, o ponto de equilíbrio é o pólo norte  $(0, 0, 1)$  da esfera de Bloch. Por conseguinte precisamos levar o sistema de equações de Bloch ao forma das equações de Kossakowsky-Lindblad.

Lembre-se também que para nosso caso o problema de saturação consiste em levar o vector da magnetização da amostra desde o ponto de equilíbrio até o centro da esfera de Bloch. Este controle pode ser conseguido mediante uma adesão à técnica padrão da RMN, a sequência de inversão-recuperação (IR), composta de um arco bang para inverter o vector da magnetização e um arco singular ao longo do eixo vertical  $z$  para alcançar o estado objetivo.

Pode-se mostrar que a solução é a união de um arco bang, um arco singular horizontal, e finalmente um arco singular vertical só usando o problema do controle

ótimo de tempo. O ganho de tempo de duração do controle foi mostrado experimentalmente em [25].

Consideremos um conjunto de spins  $1/2$  não acoplados que são irradiados em a ressonância por um campo RF magnético. Aqui consideramos homogênea a média de os spins tem a mesma deslucamento. Como o sistema considerado no instante da ressonância então  $\Delta\omega$  é anulada durante a aplicação do pulso rf em o mesmo sistema girante, a equação de movimento pode-se escrever usando a equação (2.22) que é desenvolvido no apêndice A, então nosso sistema fica

$$\begin{aligned}\frac{dM_x}{dt} &= -\frac{1}{T_2}M_x + \omega_y M_z \\ \frac{dM_y}{dt} &= -\frac{1}{T_2}M_y - \omega_x M_z \\ \frac{dM_z}{dt} &= -\omega_y M_x + \omega_x M_y - \frac{1}{T_1}M_z + \frac{1}{T_1}M_0\end{aligned}\tag{3.14}$$

onde as componentes do vector magnetização são  $\vec{M} = (M_x, M_y, M_z)$  e o ponto de equilíbrio  $M_0$  da dinâmica ao longo do eixo- $z$ . A dinâmica depende de dois termos distintos: (i) um termo é devido à variações na relaxação longitudinal ( $1/T_1$ ) e transversal ( $1/T_2$ ) e, (ii) o termo que representa o efeito das amplitudes de controle  $\omega_x$  e  $\omega_y$ .

Assume-se que o campo de controle  $\vec{\omega} = (\omega_x, \omega_y, 0)$  satisfaz  $|\vec{\omega}| \leq \omega_{\max}$  ou seja, que tem um limite superior e inferior.

Inserimos coordenadas normalizadas

$$\vec{q} = (x, y, z) = \frac{\vec{M}}{M_0}$$

que implica que no equilíbrio térmico a componente  $z$  do vector normalizado  $\vec{q}$  é por definição igual a  $+1$ . Definimos um campo de controle normalizado

$$u = (u_x, u_y, 0) = \frac{2\pi \vec{\omega}}{\omega_{\max}}$$

que satisfaz  $|u| \leq 2\pi$ , enquanto a normalização do tempo é dada pela relação

$$\tau = \frac{\omega_{\max}}{2\pi} t.$$

Ao dividir o sistema (3.14) por  $(\frac{\omega_{\max}}{2\pi} M_0)$ , pode-se deduzir que a dinâmica do sistema normalizado é dado pela seguinte conjunto de equações

$$\begin{aligned} \dot{x} &= -\Gamma x + u_y z \\ \dot{y} &= -\Gamma y - u_x z \\ \dot{z} &= \gamma(1 - z) + u_x y - u_y x \end{aligned} \tag{3.15}$$

obtendo um sistema equivalente ao sistema (3.13) onde  $\Gamma = \frac{2\pi}{\omega_{\max} T_2}$  e  $\gamma = \frac{2\pi}{\omega_{\max} T_1}$ .

Agora que é possível verificar as equações de Bloch na forma (3.13) se  $\gamma_+ = \gamma_-$ .

Agora vamos analisar um problema de controle tendo como no ponto inicial da dinâmica o ponto de equilíbrio, que para nosso caso é o pólo norte da esfera de Bloch.

O objetivo fundamental do controle consistirá em atingir à correspondente conjunto de pontos acessíveis, e em particular, chegar a centro da esfera de Bloch. O que no contexto da espectroscopia de RMN e MRI corresponde ao saturação da sinal, o que ajuda a melhorar o contraste [15, 34]. Posto que o ponto inicial é o eixo- $z$ , o problema de controle admite uma simetria de rotação em torno deste eixo. Sem perder generalidade, é possível mostrar que uma das componentes do campo de controle pode ser igual a zero, por exemplo aqui fazemos  $\omega_y = 0$ , [8, 25, 28, 29]. Nas coordenadas reduzidas, isto leva a  $u_y = 0$ . Estamos considerando um problema de uma única entrada em um plano da forma:

$$\begin{pmatrix} \dot{y} \\ \dot{z} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\Gamma y \\ \gamma - \gamma z \end{pmatrix} + u_x \begin{pmatrix} -z \\ y \end{pmatrix} \tag{3.16}$$

Este sistema pode ser escrito em uma forma mais compacta, isso é:

$$\dot{\vec{q}} = \vec{F}_0(q) + u\vec{F}_1(q), \quad (3.17)$$

onde as coordenadas de estado  $\vec{q}$  do sistema são  $(y, z)$  e  $\vec{F}_0$  e  $\vec{F}_1$  são dois campos vectoriais de componentes  $(-\Gamma y, \gamma - \gamma z)$  e  $(-z, y)$  respectivamente.

O próximo passo é encontrar uma solução analítica para esse sistema as quais serão nossas soluções bang.

### 3.3 Solução Analítica das Equações de Bloch

Para encontrar uma solução analítica direta do sistema (3.17) pode-se primeiramente encontrar uma solução para o sistema (3.14).

Existe na literatura uma variedade de trabalhos que propõem formas e métodos para a solução de tais sistemas [32, 35, 36], entre outros, nos utilizaremos a proposta feita pelo autor *A. Bain* em [32], que é desenvolvido no apêndice (B), portanto aqui só usamos aqueles resultados.

O sistema das equações de Bloch é representado pelo sistema de equações diferenciais lineares acopladas de  $4 \times 4$ ,

$$\begin{pmatrix} \dot{M}_x \\ \dot{M}_y \\ \dot{M}_z \\ \dot{M}_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -R_2 & 0 & \omega_y & 0 \\ 0 & -R_2 & -\omega_x & 0 \\ -\omega_y & \omega_x & -R_1 & R_1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} M_x \\ M_y \\ M_z \\ M_0 \end{pmatrix} \quad (3.18)$$

onde  $M_0$  é a magnetização no equilíbrio térmico e tem um valor máximo que por facilidade vai ser 1. Os tempos de relaxação são dados pela letra  $R_i$  onde  $i = 1, 2$ . Então um sistema pode ser escrito

$$\frac{d\mathbf{M}(t)}{dt} = \mathbb{A} \cdot \mathbf{M}(t), \quad (3.19)$$

tem como solução o sistema

$$\mathbf{M}(t) = \mathbf{e}^{\mathbb{A}t} \mathbf{M}(0). \quad (3.20)$$

Usando uma aproximação de segundo ordem (verificar no apêndice B) para a solução geral do sistema obtemos que o vector dos autovalores é  $\lambda = [\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4]^T$  e a matriz dos coeficientes  $\mathbb{A}$  são

$$\mathbb{A} = \begin{pmatrix} -R_2 & 0 & \omega_y & 0 \\ 0 & -R_2 & -\omega_x & 0 \\ -\omega_y & \omega_x & -R_1 & R_1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \lambda = \begin{bmatrix} -R_2 \\ -\frac{R_1+R_2}{2} + i\omega_1 \\ -\frac{R_1+R_2}{2} - i\omega_1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Seguindo o mesmo processo feito em no apêndice (B), obtemos que os valores da magnetização são

$$M_x(t) = M_1^x e^{-R_2 t} + M_2^x e^{-Rt} \cos(\omega_1 t) + M_3^x e^{-Rt} \sin(\omega_1 t) \quad (3.21)$$

$$M_y(t) = M_1^y e^{-R_2 t} + M_2^y e^{-Rt} \cos(\omega_1 t) + M_3^y e^{-Rt} \sin(\omega_1 t) \quad (3.22)$$

$$M_z(t) = M_1^z e^{-R_2 t} + M_2^z e^{-Rt} \cos(\omega_1 t) + M_3^z e^{-Rt} \sin(\omega_1 t) + M_4^z, \quad (3.23)$$

onde  $R = \frac{R_1+R_2}{2}$ ,  $\omega_1 = \sqrt{\omega_x^2 + \omega_y^2}$  e as constantes

$$M_1^x = M_x(0) \left[ \frac{(R - R_2)^2 + \omega_x^2}{(R - R_2)^2 + \omega_1^2} \right] + M_y(0) \left[ \frac{\omega_x \omega_y}{(R - R_2)^2 + \omega_1^2} \right] \quad (3.24)$$

$$M_2^x = M_x(0) \left[ \frac{\omega_y^2}{(R - R_2)^2 + \omega_1^2} \right] + M_y(0) \left[ \frac{-\omega_x \omega_y}{(R - R_2)^2 + \omega_1^2} \right] \quad (3.25)$$

$$M_3^z = M_x(0) \left[ \frac{(R - R_2) \omega_x^2}{([R - R_2]^2 + \omega_1^2) \omega_1} \right] + M_y(0) \left[ -\frac{(R - R_2) \omega_x \omega_y}{([R - R_2]^2 + \omega_1^2) \omega_1} \right] \quad (3.26)$$

$$M_1^y = M_x(0) \left[ \frac{\omega_x \omega_y}{(R - R_2)^2 + \omega_1^2} \right] + M_y(0) \left[ \frac{(R - R_2)^2 + \omega_y^2}{(R - R_2)^2 + \omega_1^2} \right] \quad (3.27)$$

$$M_2^y = M_x(0) \left[ \frac{-\omega_x \omega_y}{(R - R_2)^2 + \omega_1^2} \right] + M_y(0) \left[ \frac{\omega_x^2}{(R - R_2)^2 + \omega_1^2} \right] \quad (3.28)$$

$$M_3^y = M_x(0) \left[ \frac{(R - R_2) \omega_x \omega_y}{([R - R_2]^2 + \omega_1^2) \omega_1} \right] + M_y(0) \left[ \frac{(R - R_2) \omega_x^2}{([R - R_2]^2 + \omega_1^2) \omega_1} \right] \quad (3.29)$$

por último temos

$$M_1^z = M_z(0) \left[ -\frac{R_1 (R - R_2)^2}{([R - R_2]^2 + \omega_1^2) R_2} \right] + M_0(0) \left[ -\frac{R_1 (R - R_2)^2}{([R - R_2]^2 + \omega_1^2) R_2} \right] \quad (3.30)$$

$$M_2^z = M_z(0) \left[ \frac{\omega_1^2 (R^2 + \omega_1^2) - 2R_1 (R - R_2)^3}{([R - R_2]^2 + \omega_1^2) (R^2 + \omega_1^2)} \right] + M_0(0) \left[ \frac{2R_1 (R - R_2)}{(R - R_2)^2 + \omega_1^2} \right] \quad (3.31)$$

$$M_3^z = M_z(0) \left[ \frac{-(R - R_2)^2 (RR_1^2 - \omega_1^2 (R - 2R_1)) + \omega_1^2 (R - R_2) ((R - R_2)^2 + \omega_1^2)}{\omega_1 (R^2 + \omega_1^2) ([R - R_2]^2 + \omega_1^2)} \right] + M_0(0) \cdot \left[ \frac{2(R - R_2)^2 [2\omega_1^2 (R - R_1) - RR_1^2] + \omega_1^2 (R - R_2) (4R_1 R_2 + R(R - R_1)) + 3\omega_1^4 (R - R_2)}{([R - R_2]^2 + \omega_1^2) \omega_1} \right] \quad (3.32)$$

$$M_4^z = M_z(0) \left[ \frac{2(R - R_1)^3}{(R^2 + \omega_1^2) R_2} \right] + M_0(0) \left[ \frac{R_1 ((R - R_2)^2 + R_2^2)}{(R^2 + \omega_1^2) R_2} \right]. \quad (3.33)$$

dependem das condições iniciais  $M_x(0)$ ,  $M_y(0)$  e  $M_z(0)$ .

A solução para o sistema normalizado (3.16), onde as condições iniciais são:  $y(\tau = 0) = 0$ ,  $z(\tau = 0) = 1$  e  $y(\tau \rightarrow \infty) = 0$ ,  $z(\tau \rightarrow \infty) = 0$ , por entanto

$$y(\tau) = A_y e^{-\Gamma \tau} - e^{-\Omega \tau} [A_y \cos(|u_x| \tau) - B_y \sin(|u_x| \tau)] \quad (3.34)$$

$$z(\tau) = A_z e^{-\Gamma \tau} + e^{-\Omega \tau} [(1 - A_z) \cos(|u_x| \tau) + B_z \sin(|u_x| \tau)], \quad (3.35)$$

onde  $\Omega = \frac{\gamma + \Gamma}{2}$ ,  $\Omega^* = \frac{\gamma - \Gamma}{2}$ , e  $A_y, B_y, A_z$  e  $B_z$  são constantes que dependem dos tempos da relaxação  $T_1, T_2$  e a frequência máxima aplicada  $\omega_{\max}$ . As expressões para essas constantes são:

$$A_y = \frac{y(0) (\Omega - \Gamma)^2}{(\Omega - \Gamma)^2 + u_x^2}, \quad (3.36)$$

$$B_y = \frac{y(0) (\Omega - \Gamma) u_x^2}{([\Omega - \Gamma]^2 + u_x^2) |u_x|} \quad (3.37)$$

$$A_z = \frac{\gamma (\Omega - \Gamma)^2 [\gamma ([\Omega - \gamma]^2 + \Gamma^2) - 2 (\Omega - \gamma)^3]}{2\Gamma (\Omega - \gamma)^3 [(\Omega - \Gamma)^2 + u_x^2]} \quad (3.38)$$

$$B_z = \frac{-\gamma [(\Omega - \gamma)^2 + \Gamma^2] \{ -(\Omega - \Gamma)^2 [\Omega \gamma^2 - u_x^2 (\Omega - 2\gamma)] + u_x^2 (\Omega - \gamma) [(\Omega - \Gamma)^2 + u_x^2] \}}{2 |u_x| (\Omega - \gamma)^3 (\Omega^2 + u_x^2) [(\Omega - \Gamma)^2 + u_x^2]} +$$

$$\frac{2 (\omega - \Gamma)^2 (\Omega - \gamma)^3 [2u_x^2 (\omega - \gamma) - \Omega \gamma^2] + u_x^2 (\Omega - \Gamma) (\Omega - \gamma)^3 [4\gamma \Gamma + \Omega (\Omega - \gamma)]}{2 |u_x| (\Omega - \gamma)^3 (\Omega^2 + u_x^2) [(\Omega - \Gamma)^2 + u_x^2]} +$$

$$\frac{2u_x^4 (\Omega - \Gamma) (\Omega - \gamma)^3}{2 |u_x| (\Omega - \gamma)^3 (\Omega^2 + u_x^2) [(\Omega - \Gamma)^2 + u_x^2]} \quad (3.39)$$

Pode-se ver, que em  $A_y$  e  $B_y$  temos o termo  $y(0)$  que vai depender do valor máximo da amplitude que seja possível satisfazer em torno da função envolvente. Por exemplo, para  $T_1 = 740$  ms ,  $T_2 = 60$  ms ,  $\frac{\omega_{\max}}{2\pi} = 32.3$  Hz e  $M_0 \approx 2.15 \times 10^{-5}$  A/m [25]. Estes valores correspondem os parâmetros de uma situação experimental real em RMN.

Na figura(3.1) se exhibe o comportamento de  $z(\tau)$  e  $y(\tau)$  (magnetização normalizada na direção  $z$  e  $y$ ) em função de  $\tau$  que é a solução geral do sistema (3.16).

A diferença no sentido a trajetória são na figura (3.1) vai depender do valor  $y(0)$  já que os valores de  $u_x$  em nosso caso sempre é positivo. Então temos que para (a)-(b)  $y(0) < 0$  e  $y(0) > 0$  para o caso (c)-(d).

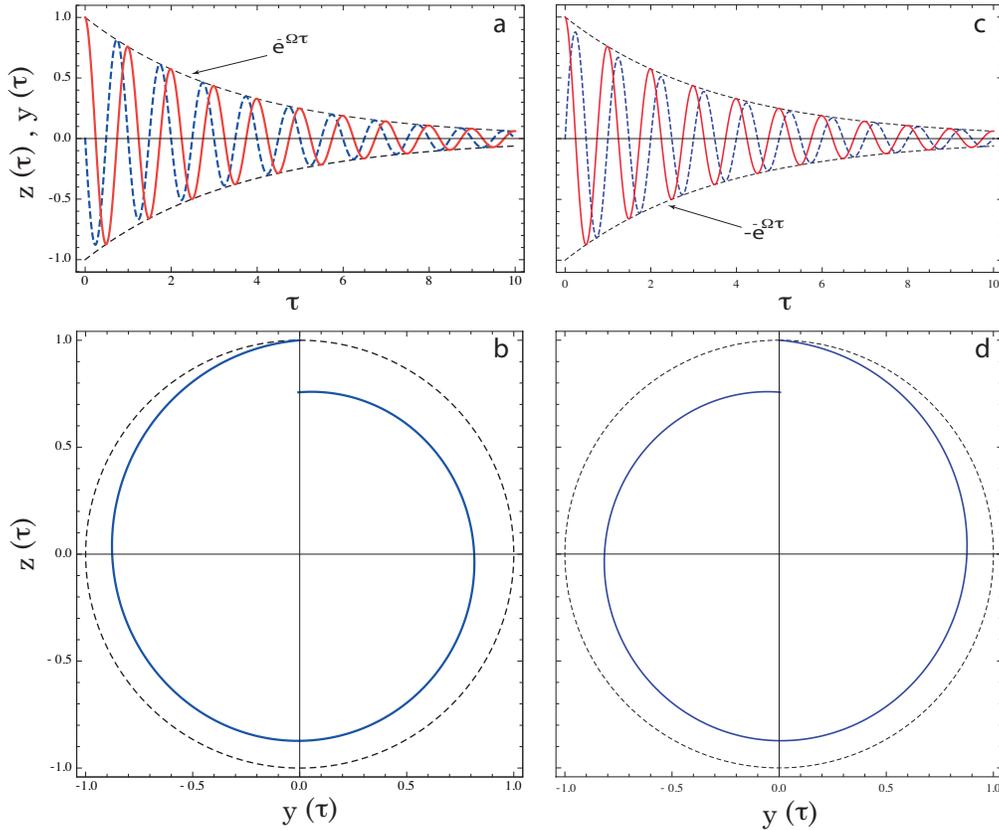


Figura 3.1: Para (a) e (b)  $y(0) < 0$  onde a linha vermelha (linha contínua) é a magnetização em a direção  $z$ , a linha azul (tracejada) é a solução da magnetização em a direção  $y$ . Para (c) e (d)  $y(0) > 0$  onde a linha vermelha (linha contínua) é a magnetização em a direção  $z$ , a linha azul (tracejada) é a solução da magnetização em a direção  $y$ .

### 3.4 O Princípio Máximo de Pontryagin

Agora, para encontrar uma solução explicita do sistema (3.17) usamos o PMP para resolver o problema de controle ótimo querendo minimizar a duração em aplicação do controle. Além disso, o campo de controle deve satisfazer a relação  $|u| \leq 2\pi$ , como falamos os seções anteriores.

Para essa tarefa é necessário encontrar o hamiltoniano do sistema (3.3), porém para facilitar o cálculo desse hamiltoniano, é mais vantajoso calcular um pseudo-

hamiltoniano  $\mathcal{H}$  para assim evitar o calculo do funcional (3.5). O pseudo-hamiltoniano é escrito em nosso caso

$$\mathcal{H} = \vec{P} \cdot \left( \vec{F}_0(\vec{q}) + u\vec{F}_1(\vec{q}) \right), \quad (3.40)$$

onde inserimos o estado adjunto dos momentos  $\vec{P}$  de componentes  $(p_y, p_z)$ . Então, o PMP nos diz que a solução ótima é um subconjunto do conjunto dos extremos que são trajetórias de  $\mathcal{H}$  com

$$\dot{\vec{q}} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \vec{P}} \quad \dot{\vec{P}} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \vec{q}} \quad (3.41)$$

A lei do controle ótimo é dada pela condição de maximização

$$\mathcal{H}(\vec{q}, \vec{P}, v) = \max_{|u| \leq 2\pi} \mathcal{H}(\vec{q}, \vec{P}, u), \quad (3.42)$$

onde  $v$  é o campo de controle que maximiza  $\mathcal{H}$ , com  $\vec{P}$  diferente do zero. No hamiltoniano não depende do tempo, se deduz que é uma constante do movimento. As equações de Hamilton podem ser escritas na forma explícita e no caso da equação (3.17),

$$\dot{\vec{q}} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \vec{P}} = \vec{F}_0(\vec{q}) + u\vec{F}_1(\vec{q}),$$

cujo comportamento é mostrado na fig.(3.2). Para o caso do momento temos

$$\dot{\vec{P}} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \vec{q}} = -\vec{P} \cdot \left( \frac{\partial \vec{F}_0}{\partial \vec{q}} + u \frac{\partial \vec{F}_1}{\partial \vec{q}} \right),$$

onde  $\partial/\partial \vec{q}$  denotam um gradiente. Sendo  $\partial \vec{F}/\partial \vec{q}$  uma matriz  $2 \times 2$  cujos elementos da linha- $i$  e a coluna- $j$  são  $\partial F_i/\partial q_j$ .

Para a construção da solução ótima precisamos ainda de introduzir dois conjuntos de pontos as quais descrevem no comportamento (suas variações) dos campos vectoriais de  $\vec{F}_0$  e  $\vec{F}_1$  em termos do gradiente  $\partial/\partial \vec{q}$ , o conjunto singular  $S$  e o conjunto de pontos colinear  $C$ . O conjunto  $C$  é definido pelos pontos  $\vec{q}$  onde os dois

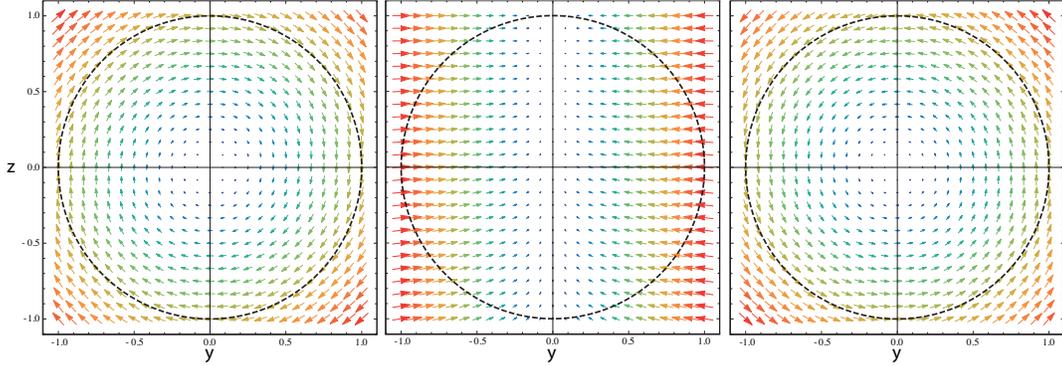


Figura 3.2: Forma da distribuição geométrica global do campo vectorial  $\vec{F}_0 + u\vec{F}_1$  para os pontos fixos  $u = -2\pi$  (esq),  $u = 0$  (meio), e  $u = 2\pi$  (dir). As setas pequenas representam a direção e o módulo de  $\vec{F}_0 + u\vec{F}_1$  em  $(y, z)$ . Os valores dos parâmetros são  $\Gamma = 0.0418$  e  $\gamma = 0.515$ .

vectores  $\vec{F}_0$  e  $\vec{F}_1$  são colineares (ou estão alinhados). Essa condição é satisfeita se o determinante dos vectores é zero.

$$\det(\vec{F}_0, \vec{F}_1) = f_1^0 f_2^1 - f_1^1 f_2^0 = 0, \quad (3.43)$$

onde  $f_i^0$  e  $f_i^1$  são as componentes de  $\vec{F}_0$  e  $\vec{F}_1$ .

Usando essa definição (3.43) temos que

$$-\Gamma y^2 + \gamma(z - z^2) = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{y^2}{\gamma/4\Gamma} + \frac{(z - 1/2)^2}{1/4} = 1$$

O conjunto  $C$  é portanto a união de duas parábolas para formar uma elipse com  $\gamma, \Gamma \neq 0$ .

A definição do conjunto  $S$  é dada pelos pontos que satisfazem a relação  $\det(\vec{F}_1, [\vec{F}_0, \vec{F}_1]) = 0$ , sendo  $[X, Y]$  o comutador dos brackets de Lie para dois campos vectoriais nas coordenadas  $q_i$ , que podem-se calcular (ver pag.32) usando

$$[X, Y]_j(q_i) = \sum_i \left( \frac{\partial Y_j}{\partial q_i} X_i - \frac{\partial X_j}{\partial q_i} Y_i \right).$$

No apêndice (C) são desenvolvidos os cálculos para a obtenção dos brackets de Lie neste capítulo.

Então, para nosso caso, obtemos:

$$\det \left( \vec{F}_1, \left[ \vec{F}_0, \vec{F}_1 \right] \right) = 2\Gamma yz + \gamma(y - 2yz) = 0.$$

Deduz-se que  $S$  é o conjunto de pontos formados pela união da linha vertical  $y = 0$  e a linha horizontal  $z_0$  dada por

$$z_0 = -\frac{\gamma}{2(\Gamma - \gamma)} = -\frac{T_2}{2(T_1 - T_2)}, \quad (3.44)$$

onde, evidentemente  $\Gamma \neq \gamma$ , o que implica  $T_1 \neq T_2$ . No caso onde  $\Gamma \leq \frac{3}{2}\gamma$  (ou seja  $\frac{2}{3}T_1 \leq T_2$ ), então só existe a linha vertical  $y = 0$  pois nosso domínio é um disco unidade. Na figura (3.3) são representados os conjuntos  $S$  e  $C$ .

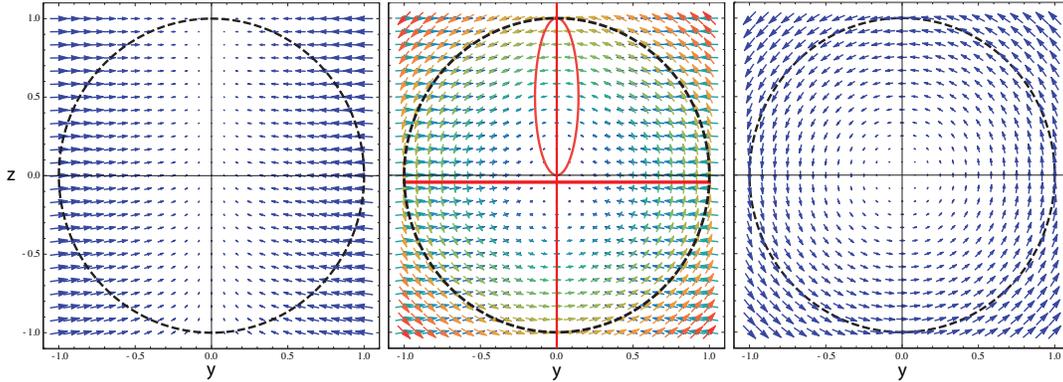


Figura 3.3: Representação dos campos vectoriais  $\vec{F}_0$  e  $\vec{F}_1$  (esq e dir). Na figura central temos o conjunto de pontos que formam  $C$  e  $S$ , (elipse) e (linha vertical e horizontal) respectivamente.

Voltando novamente a PMP, pode-se ver que a condição de maximização pode ser obtida introduzindo a função de comutação (“switching”)  $\Phi = \vec{P} \cdot \vec{F}_1 = -p_z z + p_y y$  [8, 25, 28, 29, 33]. Usando a equação (3.42) e o fato que o termo  $\vec{P} \cdot \vec{F}_0$  de  $\mathcal{H}$  não

contém elementos de controle, o que implica que o campo de controle pode ser expresso por

$$u = u_x \times \text{sign} [\Phi(t)] = \begin{cases} 2\pi & \text{se } \Phi(t) > 0 \\ u_s & \text{se } \Phi(t) = 0 \\ -2\pi & \text{se } \Phi(t) < 0 \end{cases}$$

para  $\Phi(t) \neq 0$ . O ponto é chamado regular, e o correspondente controle de amplitude constante é chamado bang. O momento onde o controle muda de sinal é o tempo de comutação e que ocorre quando  $\Phi$  é nula em um ponto isolado  $t = t_0$ . Isso é associado a uma sequência de controle bang-bang.

Agora, para o caso da situação singular, onde  $\Phi = 0$  em um intervalo  $[t_0, t_1]$ . Até aqui é importante ressaltar o fato de as trajetórias singulares que estão incluídas em  $S$ . Isso pode ser demonstrado ao determinar a relação  $\Phi(t) = \dot{\Phi}(t) = 0$  no intervalo  $[t_0, t_1]$ . A Primeira derivada de  $\Phi$  é:

$$\dot{\Phi} = \dot{\vec{P}} \cdot \vec{F}_1 + \vec{P} \cdot \dot{\vec{F}}_1$$

Se fizemos  $\dot{\vec{F}}_1 = \frac{\partial \vec{F}_1}{\partial \vec{q}} \cdot \dot{\vec{q}}$ , usamos  $\dot{\vec{P}} = -\vec{P} \cdot \left( \frac{\partial \vec{F}_0}{\partial \vec{q}} + u \frac{\partial \vec{F}_1}{\partial \vec{q}} \right)$  obtemos

$$\dot{\Phi} = \vec{P} \cdot [\vec{F}_0, \vec{F}_1].$$

Pode-se ver que no sistema  $\Phi(t) = \dot{\Phi}(t) = 0$  há uma solução com  $\vec{P} \neq 0$ , se os vectores  $[\vec{F}_0, \vec{F}_1]$  e  $\vec{F}_1$  são paralelos. O seja, isso é verificável se

$$\det \left( \vec{F}_1, [\vec{F}_0, \vec{F}_1] \right) = 0.$$

No cálculo anterior não foi possível obter a forma explícita do controle singular  $u_s$ , porém é possível calcular a segunda derivada de  $\Phi$  [8, 25, 29]. De fato, um cálculo semelhante ao anterior poder-se obter uma expressão analítica para o controle usando

$$\ddot{\Phi} = \vec{P} \cdot \left[ [\vec{F}_1, \vec{F}_0], \vec{F}_0 \right] + u \vec{P} \cdot \left[ [\vec{F}_1, \vec{F}_0], \vec{F}_1 \right] = 0,$$

no qual é verificável para  $\vec{P} \neq 0$  então

$$N = \det \left( \vec{F}_1, \left[ \left[ \vec{F}_1, \vec{F}_0 \right], \vec{F}_0 \right] \right) = 0, \quad D = \det \left( \vec{F}_1, \left[ \left[ \vec{F}_1, \vec{F}_0 \right], \vec{F}_0 \right] \right) = 0$$

Portanto de  $\ddot{\Phi} = 0$ , obtemos o controle singular de maneira explícita é

$$u_s = - \frac{\vec{P} \cdot \left[ \left[ \vec{F}_1, \vec{F}_0 \right], \vec{F}_0 \right]}{\vec{P} \cdot \left[ \left[ \vec{F}_1, \vec{F}_0 \right], \vec{F}_1 \right]}$$

onde  $\vec{P} \cdot \left[ \left[ \vec{F}_1, \vec{F}_0 \right], \vec{F}_1 \right] \neq 0$ . Neste sentido, temos que  $u_s = \frac{N}{D}$  e obtemos:

$$u_s(y, z) = \frac{-y\gamma(\Gamma - 2\gamma) - 2yz(\gamma^2 - \Gamma^2)}{2(\Gamma - \gamma)(y^2 - z^2) - \gamma z} \quad (3.45)$$

1. Para  $y = 0$ , onde  $\delta = \gamma - \Gamma$ , temos que  $D = -z(\gamma - 2\delta z)$ ,  $N = 0$ . O controle singular é zero e a solução para na linha vertical singular é

$$\dot{y} = -y \quad \text{e} \quad \dot{z} = \gamma(1 - z) \quad (3.46)$$

onde o ponto de equilíbrio  $(0, 1)$  é estável, se  $\gamma \neq 0$ .

2. Para  $z = z_0$ , temos que  $D = -2\delta y^2$ ,  $N = y\gamma(2\Gamma - 2\gamma)$  então

$$u_s = \frac{\gamma(2\Gamma - \gamma)}{2\delta y} = \frac{\gamma(\gamma - 2\Gamma)}{2(\Gamma - \gamma)y} \quad (3.47)$$

onde  $2\Gamma - \gamma \geq 0$ . Portanto, ao longo da direção horizontal a trajetória é regida por

$$\dot{y} = -\Gamma y - \frac{\gamma^2(2\Gamma - \gamma)}{4\delta^2 y}, \quad (3.48)$$

pode-se olhar que o denominador é diferente de zero em  $S$  até a interseção das duas linhas singulares (vertical e horizontal), em tal caso ocorre  $|u_s| \rightarrow +\infty$  quando  $y \rightarrow 0$ .

É importante determinar os valores permitidos para o controle singular a partir da condição do controle  $|u_s| \leq 2\pi$ . Usando (3.47) obtemos que o controle singular é permitido em linha

$$|y| \geq \left| \frac{\gamma(\gamma - 2\Gamma)}{2\pi(2\Gamma - 2\gamma)} \right|. \quad (3.49)$$

Para valores de  $y$  bem próximos de zero, o sistema não pode seguir o arco singular horizontal e modificamos a trajetória através da utilização de um pulso bang. Esse fenômeno é denominado saturação do campo de controle.

### 3.5 Tempo Ótimo de Controle em Partículas de Spin 1/2

Aplicando as ferramentas das sec.(3.3-3) para o controle de partículas com spin 1/2. Onde usamos para nosso estudo do problema de controle os seguintes parâmetros de relaxação  $\gamma^{-1}$  e  $\Gamma^{-1}$  (expresso em unidades do tempo normalizado) de 23.9 e 1.94, respectivamente e  $M_0 \approx 2.15 \times 10^{-5}$  A/m. Onde  $T_1 = 740$  ms,  $T_2 = 60$  ms e  $\frac{\omega_{\max}}{2\pi} = 32.3$  Hz são valores usados em uma situação em RMN [25].

#### 3.5.1 O Problema de Controle da Saturação

Nesta parte do trabalho, estudamos o problema de controle da saturação, que consiste em levar o vector da magnetização do estado inicial até no centro da esfera de Bloch em um tempo mínimo.

Comparamos a lei de controle ótimo com um método intuitivo usado em RMN, a sequência *Inversion Recovery* (IR) [15]. Essa sequência é formada por um pulso bang para atingir o ponto oposto do estado inicial ao longo do eixo-z seguido por um controle zero e é deixado voltar por os efeitos da dissipação até ao centro da esfera de Bloch. As soluções ótimas e a solução intuitiva são indicadas na fig.(3.3).

Usando para isso os resultados dos tópicos anteriores, deduz-se que o controle ótimo é formado pela concatenação de um pulso bang, seguida sucessivamente pelo controle singular ao longo da linha singular horizontal, depois outro pulso bang e por último um controle singular zero ao longo da linha singular vertical. A dinâmica deixa linha horizontal antes que seja possível atingir o eixo vertical desde o ponto  $(y_0, z_0)$ . A coordenada  $y_0$  é determinada usando (3.48), com isso temos o ponto inicial. O ponto final até a linha vertical estará por cima mas próximo do valor  $z = z_0$  que não exceda os valores de  $u_s$ . Para este exemplo, é possível chegar ao centro da esfera de Bloch com uma precisão melhor que  $10^{-15}$ . As durações das duas sequências são 202 ms para a solução ótima e 478 ms para no pulso IR. Portanto, pode-se ver uma vantagem comparativa de mais do 55% para a solução ótima sobre a solução intuitiva. Com esse resultado demonstra-se a importância dos controles singulares. As duas soluções consideradas usam controles singulares, ao longo das linhas horizontal e vertical da sequência ótima e ao longo do eixo vertical para a solução IR. A diferença entre as duas trajetórias resulta o fato que os controles singulares são ótimos para as trajetórias por a lei do controle ótimo, enquanto para no caso IR não temos trajetórias singulares. A diferença entre os tempos de duração do controle podem ser calculados analiticamente para o caso onde o controle não tem limites. Mais exatamente, só consideramos o limite onde  $\omega_{\max} \rightarrow \infty$ . Nesse caso, a solução ótima só se compõe de um arco bang seguido dos controles singulares ao longo da horizontal e as linhas verticais já que não tem a condição de admissibilidade em no controle.

Em primeiro lugar, calculamos a duração da sequência IR. O primeiro pulso bang permite chegar instantaneamente ao polo sul da esfera de Bloch. A segunda parte do controle usa a dissipação longitudinal com um campo de controle zero para ir até o centro da esfera de Bloch. A dinâmica da trajetória é regida por:

$$\dot{z} = (1 - z) \frac{1}{T_1}. \quad (3.50)$$

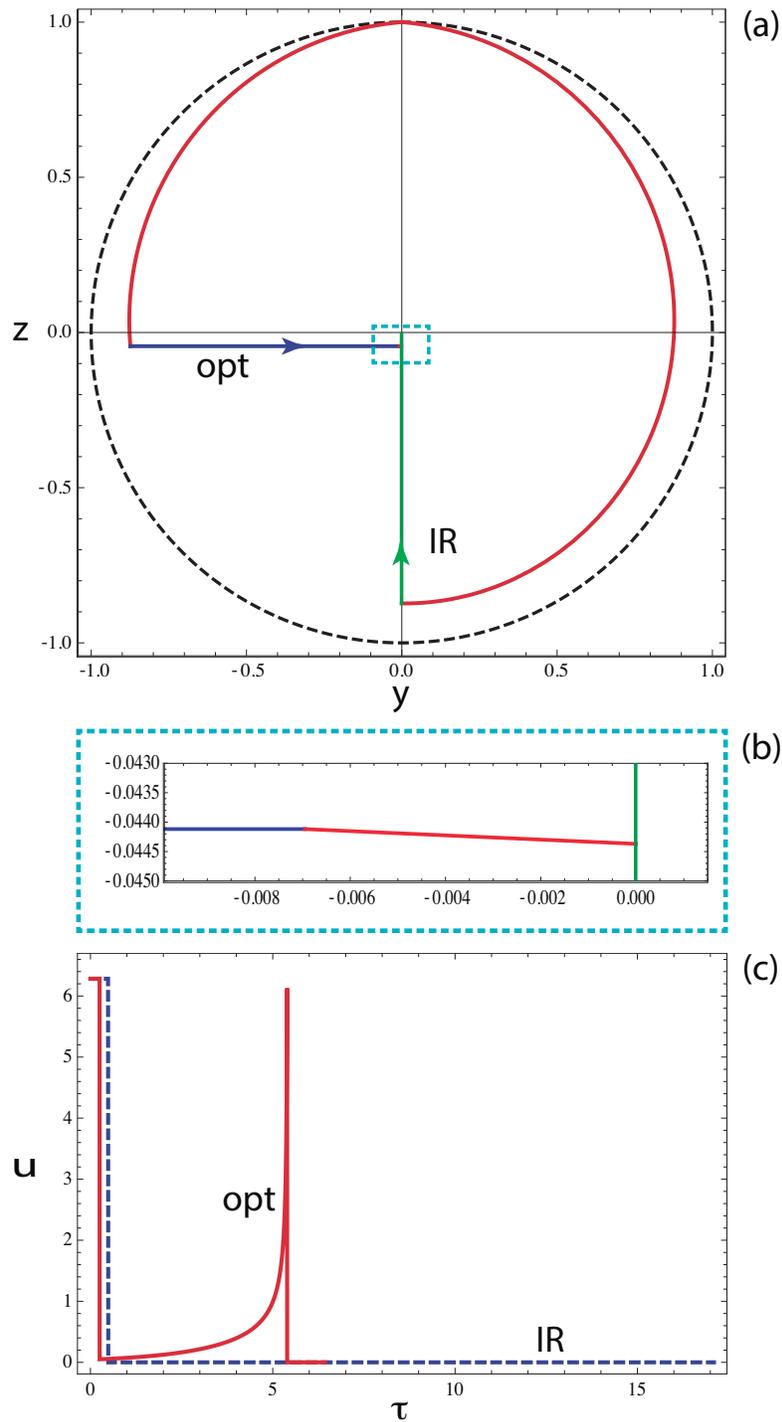


Figura 3.4: (a) Representação das trajetórias ótimas (vermelho-azul) e a sequência Inversion Recovery (IR) (vermelho-verde) no plano  $(y, z)$ , para  $T_1 = 740$  ms,  $T_2 = 60$  ms, e  $\frac{\omega_{\max}}{2\pi} = 32.2$  Hz. (b) se mostra um zoom da trajetória ótima perto no origem. (c) as leis do controle para cada caso.

Note que, o tratamento não pode utilizar os parâmetros  $\Gamma$ ,  $\gamma$  e o tempo reduzido  $\tau$  por que eles dependem da  $\omega_{\max}$ . A solução da eq.(3.50) é

$$z(t) = (z(0) - 1) e^{-\frac{t}{T_1}} + 1$$

com  $z(0) = -1$ . O próximo passo é determinar o tempo  $t_1$  que satisfaz  $z(t_1) = 0$ . O tempo é  $t_1 = T_1 \ln(1 - z(0)) = T_1 \ln 2$ .

Para a solução ótima, o primeiro passo é realizar um pulso bang até atingir a linha horizontal singular no ponto de coordenadas  $(y, z_0)$  onde  $y^2 + z_0^2 = 1$ . O segundo passo consiste em seguir essa linha. Sabemos que a dinâmica da trajetória e o controle singular são:

$$\begin{cases} \dot{y} = -\frac{1}{T_2}y - u_s z_0 \\ u_s = -\frac{1}{y} \left( \frac{1}{2T_1} \frac{2T_1 - T_2}{T_1 - T_2} \right) \end{cases} \quad (3.51)$$

A solução para essa equação é

$$y^2(t) = \left( \frac{\alpha T_2}{2} + y^2(0) \right) e^{-2\frac{t}{T_2}} - \frac{\alpha T_2}{2}.$$

onde  $\alpha = \frac{T_2(2T_1 - T_2)}{2T_1(T_1 - T_2)^2}$ . Começando da coordenada  $y^2(0) = 1 - z_0^2$  e seguindo a linha singular até  $y^2(t_2) = 0$ , obtemos o tempo de duração  $t_2 = \frac{T_2}{2} \ln \left( 1 + \frac{2y^2(0)}{\alpha T_2} \right)$ . A última parte da solução é determinar a duração sobre a linha vertical singular com  $u_s = 0$ . Usamos a expressão para IR e a solução desde  $z(0) = z_0$  até o centro da esfera de Bloch obtemos  $t_3 = T_1 \ln(1 - z_0)$  Finalmente os tempos são:

$$\begin{cases} T_{opt} = \frac{T_2}{2} \ln \left[ 1 + \frac{2(1-z_0^2)}{\alpha T_2} \right] + T_1 \ln(1 - z_0) \\ T_{IR} = T_1 \ln 2. \end{cases} \quad (3.52)$$

Como é de esperar, os tempos só dependem dos parâmetros da relaxação  $T_1$  e  $T_2$ . A solução ótima usa ativamente a relaxação transversal para chegar ao estado do destino final em um tempo mínimo. Para esse caso, a razão entre os dois tempos

de duração é 0.389. Na próxima seção mostramos como essa relação varia para diferentes valores de  $\omega_{\max}$ , e como muda para diferentes parâmetros de relaxação.

## 3.6 Resultados Importantes

Neste seção serão apresentados alguns resultados obtidos ao aplicar o método PMP para diferentes valores de  $T_1$  e  $T_2$  que são os tempos da relaxação em mostras conhecidas. Também será apresentado alguns comportamentos no controle e os tempos de relaxação. Para uma possível construção experimental dos pulsos ótimos só é necessário conhecer os tempos de relaxação, o valor da frequência máxima aplicada e a duração do cada pulso. É necessário ter claro as limitações no aparelho na hora de aplicar pulsos com tempos muito curtos.

Os diferentes resultados analisados serão apresentados onde os tempos de relaxação ou a frequência máxima atuam como variáveis.

### 3.6.1 Comportamento das sequências ótimas para diferentes frequências

Na figura (3.5) é apresentada a evolução ótima e a solução intuitiva quando a amplitude máxima do controle varia. Neste ponto pode-se ver claramente que a relação do tempo ótimo da eq.(3.52) com respeito ao tempo de relaxação na sequência IR vai depender da frequência máxima aplicada  $\frac{\omega_{\max}}{2\pi}$ .

Para valores de frequência  $\left(\frac{\omega_{\max}}{2\pi}\right)$  pequenos, os pulsos ótimos e a sequência IR são do mesmo ordem ou similares, mas uma vez que a razão entre elas é perto de 1. Além disso, para valores de  $\frac{\omega_{\max}}{2\pi} \lesssim 2.5\text{Hz}$ , o estado final (no extremo singular horizontal) não pode ser alcançado desde no estado inicial pelo que no cociente não pode ser definido.

No gráfico também é possível ver que para valores de  $\frac{\omega_{\max}}{2\pi} \geq 32.3\text{Hz}$ , as trajetórias ótimas estão muito próximas, Isto significa que a razão entre  $T_{op}$  e  $T_{IR}$  tendem

rapidamente a 0.389. Isso mostra a importância da linha singular horizontal em nosso problema.

Usando a eq.(3.52) temos que para  $T_1 = 740$  ms,  $T_2 = 60$  ms e  $\frac{\omega_{\max}}{2\pi} = 2.7, 10, 32.3, 50, 200$  e 500 Hz:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{T_{opt}}{T_{IR}} = 0.389 \implies \frac{\omega_{\max}}{2\pi} \rightarrow \infty \\ \frac{T_{opt}}{T_{IR}} = 1 \implies \frac{\omega_{\max}}{2\pi} \rightarrow 1 \end{array} \right.$$

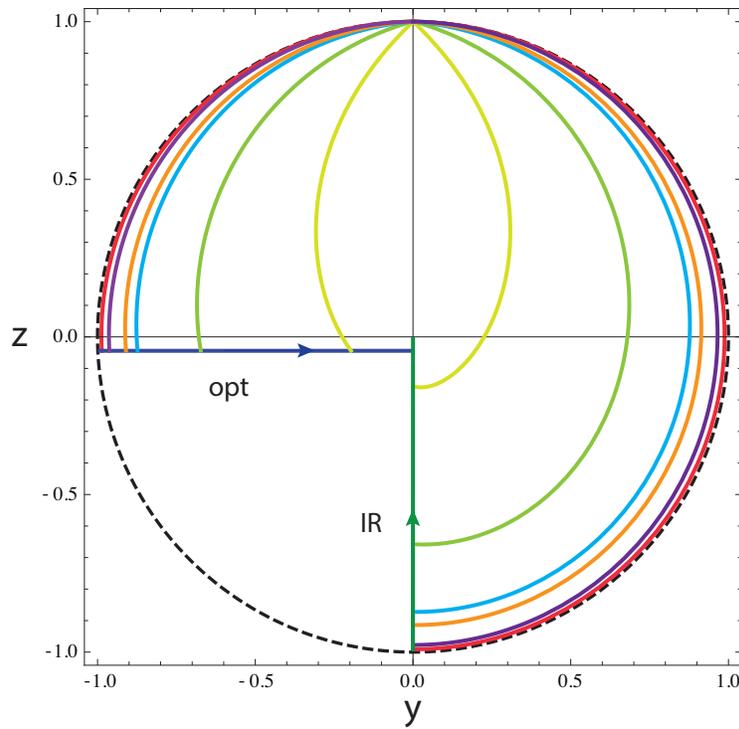


Figura 3.5: Representação das trajetórias ótimas (parte esquerda) e a sequência Inversion Recovery (IR) (parte direita) para  $\frac{\omega_{\max}}{2\pi} = 2.7, 10, 32.3, 50$  e 200 Hz. As zetas indicam no sentido seguido pelas trajetórias.

### 3.6.2 Comportamento das sequências ótimas em função dos tempos de relaxação

A fig.(3.6) mostra a evolução das trajetórias ótimas quando o parâmetro dissipativo  $T_2$  varia, enquanto  $T_1$  é mantido fixo.

Então, usando os valores numéricos de  $T_2 = 295, 138$  e  $60$  ms os valores correspondentes em coordenadas reduzidas são  $\Gamma = 0.1048, 0.2241$  e  $0.5160$ . Agora, se usamos a eq.(3.44) fazendo  $z_0 = n$ , onde usamos  $z_0$  é a posição singular horizontal, obtemos

$$T_2 = \frac{2nT_1}{2n - 1}.$$

A figura (3.6), mostra que os diferentes pontos extremos apresentam a mesma estrutura qualitativa, com uma sequência de pulsos compostos pelo bang, um singular horizontal, outro bang e um extremo singular vertical para atingir a origem. As trajetórias ótimas só diferem na duração dos pulsos bang e dos arcos singulares. Até aqui podem-se considerar dois casos limite. No primeiro quando  $n = 0$ , cuja situação prática é  $T_2 \ll T_1$  ou  $\gamma \ll \Gamma$ , ou seja, que a relaxação longitudinal é desprezável com respeito à relaxação transversal. Então, a solução ótima é composta pelo arco bang seguida pelo arco singular horizontal com  $z = 0$  até o centro da esfera de Bloch. Ao longo deste arco, temos  $u_s = 0$  com  $\gamma \approx 0$ .

O outro caso limite é quando  $n = -1$ , temos  $T_2 = \frac{2T_1}{3}$  para os que a sequência IR é ótima. Em conclusão temos que para  $n < -1$  a solução também é ótima mas ele sai da esfera unitário de Bloch.

Outro ponto importante para notar é que para tempos de relaxação  $T_1$  fixos, enquanto  $T_2$  é variável temos que na comparação das sequências opt e IR as diferenças em nos tempos de relaxação são muito maiores usando no método opt. Isso poder ser importante na hora de produzir diferentes contrastes.

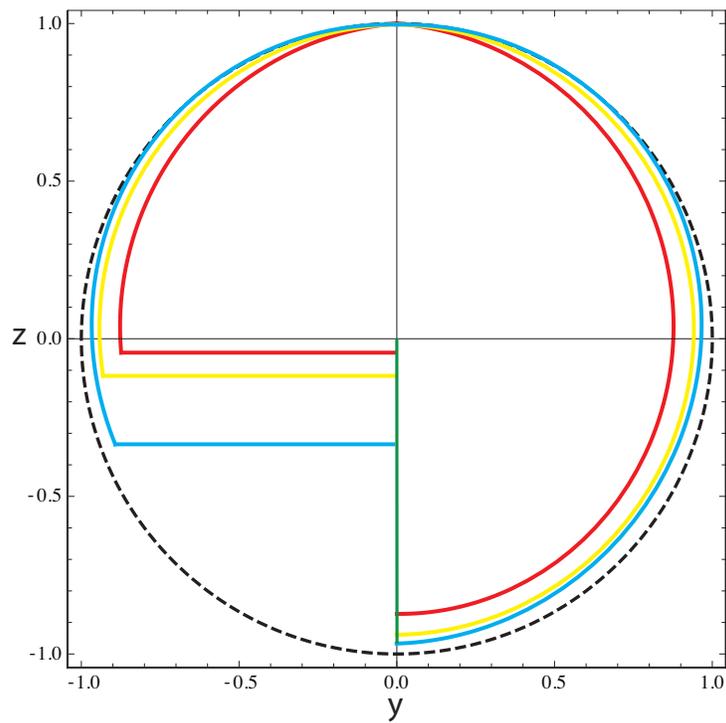


Figura 3.6: Evolução do vector magnetização ao longo da trajetória ótima para  $\Gamma = 0.1048, 2241$  e  $0.5160$  (cyan, amarelo, vermelho) onde  $\gamma = 0.0418$  e  $\frac{\omega_{\max}}{2\pi} = 32.3$  Hz estão fixos.

## Capítulo 4

### Conclusões e perspectivas

Aplicações de métodos de controle ótimo tem ganho enorme visibilidades devido a necessidade de manipulação de alta fidelidade e curta duração em implementações de algoritmos quânticos utilizando RMN. A maioria dos métodos utilizados para a preparação de seqüências de pulsos otimizados consiste em implementações numéricas. Estas, apesar de superiores quando comparadas com métodos analíticos intuitivos dificultam bastante a interpretação física dos controles e das trajetórias da magnetização. A ausência de resultados analíticos ou de métodos de visualização de trajetórias de magnetização tornam essa área extremamente especializada.

O método geométrico de controle ótimo tem origens no cálculo variacional em mecânica lagrangeana e hamiltoniana. Os aspectos de otimização modernos desse tipo de controle foram demonstrados nos anos 60 por Pontryagin e colaboradores. Esse método torna-se muito atraente pois permite a obtenção, em alguns casos, de formas analíticas fechadas para os controles e trajetórias de magnetização. O mais promissor até o momento tem sido aquele envolvendo o fenômeno de saturação de magnetização e obtenção de contraste por essa metodologia. Recentemente o controle ótimo tanto para minimização de energia dos controles foram apresentados e implementados experimentalmente. Essa implementação e o ganho obtido em comparação com outras metodologias gerou um enorme interesse nesse tipo de abordagem. Apesar de analítico do ponto de vista de obtenção dos controles, a obtenção

das condições iniciais para os valores de trajetória, no caso magnetização, para os diversos trechos, regulares, ainda tem sido obtidas numericamente. Nessa dissertação realizamos a implementação do método exatamente as equações de Bloch para cada um dos trechos de magnetização da trajetória ótima.

Apesar de extremamente poderoso do ponto de vista de resultados analíticos e de entendimento da forma dos controles, o método de controle ótimo de Pontryagin possui limitações. A mais importante diz respeito a dificuldade de obtenção explícita de controles para configurações de controle mais elaboradas. Sistemas com múltiplos níveis de energia também dificultam a interpretação geométrica em termos de trajetórias na esfera de Bloch.

O fato de aplicações em imageamento consistirem amplamente na manipulação de sistemas de dois níveis torna o método atraente para aplicações nessa área. Outro ponto importante é o fenômeno de saturação que é bastante utilizado na obtenção de contraste em imagens médicas. Além disso, os tempos de relaxação  $T_1 \gg T_2$  em tecidos biológicos estão no regime favorável para redução de tempo quando comparados aos intervalos obtidos pela técnica padrão de inversão-recuperação.

Finalmente concluímos que uma combinação de métodos analíticos e numéricos prometem ser a bordagem ideal. O método geométrico, apesar de poderoso, torna-se também bastante complicado em situações não ideais nas quais o ambiente de controle é espacialmente ou temporalmente variável. Métodos numéricos de otimização, como GRAPE, já vem sendo utilizados em conjunto com métodos geométricos nos quais esse últimos servem para a obtenção de uma solução ótima inicial em situação ideal e o primeiro, utilizando essa solução tentativa, realiza o estudo em função de variações no tipo de controle.

A implementação do método de controle ótimo geométrico para o caso específico de magnetização, e os correspondentes ganhos em tempo são encorajadores. Entretanto a aplicação do método para outros tipos de manipulação precisam ser demonstrados.

Algumas conclusões e perspectivas finais podem ser descritas aqui em baixo:

1. Foi possível construir uma solução analítica das equações de Bloch em ressonância.
2. Se conseguiu investigar o método PMP e construir as soluções analíticas mostrando que funcionam.
3. Se produziu uma solução analítica para gerar sequências de pulsos que saturam a magnetização em um tempo mínimo.
4. O método de controle pode ser usado para aplicações gerais; sempre que seja possíveis construir o pseudo-hamiltoniano para obter as soluções ótimas.
5. Apesar de ser um sistema dos mais simples, que são os sistemas de dois níveis, ele apresenta todas as famílias de trajetórias possíveis que o método pode analisar. (sol. bang, bang-bang e singular bang, horizontal-vertical)
6. Em um futuro imediato queremos estudar o comportamento da saturação no sistema de spin  $1/2$  usando os dois controles  $\vec{u} = (u_x, u_y, 0)$ .
7. Gostaríamos de estender o método para o caso de pulsos fora da ressonância e assim poder testar a robustez das soluções otimizadas nesse tipo de ambiente.
8. Estudar se existem outros tipos de soluções ótimas em forma analítica para sistemas diferentes.

# Refêrencias

- [1] F. Bloch, W. W. Hansen, M. Packard, “Nuclear Induction”, Phys. Rev., **69**, 127, (1946).
- [2] E. M. Purcell, H. C. Torrey, R. V Pound, “Nuclear Induction”, Phys. Rev., **69**, 37, (1946).
- [3] Raymond Damadian, Ken Azaner, Doris Hor and Theresa Dimaio “Human Tumors Detected by Nuclear Magnetic Resonance (*spin-lattice relaxation/pulse nuclear magnetic resonance malignancy*)”, Proc. Nat. Acad. Sci. USA, Vol. **71**, No. **4**, pp. 1471-1473, April (1974).
- [4] P. C. Lauterbur, “Imagem Formation by Induced Local Interactions: Examples Employing Nuclear Magnetic Resonance”, Nature Journal, Vol.**242**, 5394, (1973).
- [5] Laura Oleaga Zufiría, Javier Lafuente Martínez, “Aprendiendo los fundamentos de la resonancia magnética”, Sociedad Española de Radiología Médica, (2006).
- [6] David G. Luenberger “Introduction to Dynamic Systems: Theory, Models and Applications”, John Wiley & Sons, Inc. (1979).
- [7] L. S. Pontryagin, V. G. Boltyanskii, R. V. Gamkrelidze, and E. F. Mishchenko “The Mathematical Theory of Optimal Processes”, John Wiley & Sons, Inc. (1962).
- [8] Bernard Bonnard, Monique Chyba. “Singular Trajectories and their Role in Control Theory”, *Mathematiques & Applications 40*, Springer, (2003).

- [9] R. W. Brockett, "System theory on group manifolds and coset spaces", SIAM J. Control Optim., **10**, 265-284, (1970).
- [10] R. W. Brockett, "Lie theory and control systems defined on spheres", SIAM J. Appl. Math. **25**, 213-225, (1973).
- [11] D. Q. Mayne, R. W. Brockett, "Lie algebras and Lie groups in Control Theory Geometric Methods in System Theory", Eds. Reidel, Dordrecht, 43-82, (1973).
- [12] E. Mark Haacke, Robert W. Brown, Michael R. Thompson, Ramesh Venkatesan, "Magnetic Resonance Imaging: Physical Principles and Sequence Design", WILEY-LISS (1999).
- [13] Pul C. Lauterbur, Zhi-Pei Liang, "Principles of Magnetic Resonance Imaging: A signal Processing Perspective", IEEE Press, (2000).
- [14] Charles P. Slichter, "Principles of Magnetic Resonance", 3 Ed., Springer-Verlag, (1989).
- [15] G. M. Bydder, J. V. Hajnal and I. R. Young, "MRI: Use of the Inversion Recovery Pulse Sequence", Clinical Radiology, **53**, 159-176, 1998.
- [16] Matt A. Bernstein, Kevin F. King, Xiaohong Joe Zhou, "Hand Book of MRI Pulse Sequences", Elsevier Academic Press, (2004).
- [17] A. Abragam, "The Principles of Nuclear Magnetism", Oxford at The Clarendon Press. (1961).
- [18] Domenico D'Alessandro, "Introduction to Quantum Control and Dynamics", Chapman & Hall/CRC, (2008).
- [19] S. Rice, M. Zhao, "Optimal Control of Quantum Dynamics", Wiley, New-York, (2000).

- [20] Richard R. Ernst, , Geoffrey Bodenhausen, Alexander Wokaun, “Principles of Nuclear Magnetic Resonance in One and Two Dimensions”, International Series of Monographs on Chemistry, Oxford University, Oxford University Press, (1990).
- [21] Malcolm H. Levitt, “Spin Dynamics: Basics of Nuclear Magnetic Resonance”, John Wiley & Son, (2001).
- [22] N. Khaneja, T. Reiss, C. Kehlet, T. Schulte-Herbrüggen, Steffen J. Glaser, “Optimal Control of Coupled Spin Dynamics: Design of NMR Pulse Sequences by Gradient Ascent Algorithms”, J. Magn. Reson., **172**, 296-305, (2005).
- [23] Thomas E. Skinner, Timo O. Reiss, Burkhard Luy, Navin Khaneja e Steffen J. Glaser, “Application of Optimal Control Theory to the Dising of Broadband Excitation Pulses for High-Resolution NMR”, J. Magn. Reson., **163**, 8-15, (2003).
- [24] N. Khaneja, R. Brockett and Steffen J. Glaser, “Time Optimal Control in Spin Systems”, Phys. Rev. A, **63**, 032308, (2001).
- [25] M. Lapert, Y. Zhang, M. Braun, S. J. Glaser and D. Sugny, “Singular Extremals for the Time-Optimal Control of Dissipative Spin 1/2 Particles”, Phys. Rev. Lett., **104**, 083001, (2010).
- [26] Ugo Boscain, Benetto Piccoli, “An Introduction to Optimal Control”, SISSA-ISAS, Via Beirut 2-4, 34014 Trieste, Italy. “boscain@sissa.it”
- [27] Ugo Boscain, “A Review on stability of switched systems for arbitrary switchings”, SISSA-ISAS, Via Beirut 2-4, 34014 Trieste, Italy. “boscain@sissa.it”
- [28] Dominique Sugny, “Geometric Optimal Control of Simple Quantum Systems: *Geometric optimal control theory*”, John Wiley & Sons. Inc., (2010).
- [29] Bernard Bonnard, Oliver Cots, Steffen J. Glaser, Marc Lapert, Dominique Sugny and Yun Zhang, “Geometric Optimal Control of Contrast Imaging Pro-

- blem in Nuclear Magnetic Resonance”, IEEE Trans. Automat. Control, **57**, No. 8, 1957-1969, (2012).
- [30] M. Lapert, Y. Zhang, S. J. Glaser and D. Sugny, “Towards the Time-Optimal Control of Dissipative Spin 1/2 Particles in Nuclear Magnetic Resonance”, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., **44**, 154014 (9pp), (2011).
- [31] Y. Zhang, M. Lapert, D. Sugny, M. Braun and S. J. Glaser, “Time-Optimal Control of Spin 1/2 Particles in the Presence of Radiation Damping and Relaxation”, J. Chem. Phys., **134**, 054103, (2011).
- [32] Alex D. Bain, C. Kumar Anand, Zhenghua Nie, “Exact Solution to the Bloch Equations and Application to the Hahn Echo”, J. Magn. Reson., **206**, 227-240, (2010).
- [33] Bernard Bonnard, Monique Chyba and Dominique Sugny, “Time-Minimal Control of Dissipative Two-Level Quantum System: *The Generic Case*”, IEEE Trans. Automat. Control, 0018-9286, (2009).
- [34] G. M. Bydder and I. R. Young, “MRI: Use of the Inversion Recovery Pulse Sequence”, Journal of Computer Assisted Tomography, 9(4):659-675, 1985.
- [35] Willam. E. Boyce, Richard C. DiPrima, “Elementary Differential Equations and Bound Value Problems”, John Wiley & Sons, Inc., 7th Ed, (2000).
- [36] Gareth A. Morris and Paul B. Chilvers, “General Analytical Solutions of the Bloch Equations”, J. Magn. Reso. Series A, **107**, 236-238, (1994).

# Apêndice A

## Apêndice: Equações de Bloch

O sistema descrito na seção 2.1.2 pela eq.(2.22) tem como ponto de equilíbrio o pólo sul; então para virar essa orientação só é necessário trocar de posição  $\vec{\mathbf{M}}$  e  $\vec{\mathbf{B}}$  com isso as componentes da equação de Bloch para no caso onde a magnetização tenha como ponto de equilíbrio o pólo norte da esfera de Bloch. Por simplicidade nos consideramos  $\vec{\mathbf{B}} = \vec{\mathbf{B}}_0 + \vec{\mathbf{B}}_1$ . Por enquanto temos

$$\frac{d\vec{\mathbf{M}}}{dt} = \gamma \vec{\mathbf{B}} \times \vec{\mathbf{M}} - \frac{M_x \hat{i} + M_y \hat{j}}{T_2} - \frac{(M_z - M_0) \hat{k}}{T_1} \quad (\text{A.1})$$

Então so temos que calcular o produto vectorial  $\vec{\mathbf{B}} \times \vec{\mathbf{M}}$ , onde temos:

$$\vec{\mathbf{M}} = M_x \hat{i} + M_y \hat{j} + M_z \hat{k} \quad (\text{A.2})$$

$$\begin{aligned} \vec{\mathbf{B}} &= \vec{\mathbf{B}}_0 + \vec{\mathbf{B}}_1 \\ &= B_1^x \hat{i} + B_1^y \hat{j} + B_0 \hat{k} \\ &= B_1 \cos \phi \hat{i} + B_1 \sin \phi \hat{j} + B_0 \hat{k} \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

onde  $|\vec{\mathbf{B}}_1| = \sqrt{(B_1 \cos \phi)^2 + (B_1 \sin \phi)^2}$ . Por enquanto temos

$$\vec{\mathbf{B}} \times \vec{\mathbf{M}} = \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ B_x & B_y & B_z \\ M_x & M_y & M_z \end{vmatrix} = (B_y M_z - B_z M_y) \hat{i} + (B_z M_x - B_x M_z) \hat{j} + (B_x M_y - B_y M_x) \hat{k}$$

O sistema fica

$$\begin{aligned} \frac{dM_x}{dt} &= \gamma (B_y M_z - B_z M_y) - \frac{1}{T_2} M_x \\ \frac{dM_y}{dt} &= \gamma (B_z M_x - B_x M_z) - \frac{1}{T_2} M_y \\ \frac{dM_z}{dt} &= \gamma (B_x M_y - B_y M_x) - \frac{1}{T_1} M_z + \frac{1}{T_1} M_0 \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

re-escrevendo obtemos

$$\begin{aligned} \frac{dM_x}{dt} &= -\frac{1}{T_2} M_x - \Delta\omega M_y + \omega_y M_z \\ \frac{dM_y}{dt} &= \Delta\omega M_x - \frac{1}{T_2} M_y - \omega_x M_z \\ \frac{dM_z}{dt} &= -\omega_y M_x + \omega_x M_y - \frac{1}{T_1} M_z + \frac{1}{T_1} M_0 \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

Onde chamamos geralmente as frequências como:  $\omega_x = \gamma B_x = \gamma B_1 \cos \phi$ ,  $\omega_y = \gamma B_y = \gamma B_1 \sin \phi$  e a frequência offset é  $\Delta\omega = \omega_{rf} - \omega_0$ . Os valores de relaxação são  $R_i = \frac{1}{T_i}$ , onde  $i = 1, 2$

Agora, escrevemos o sistema em forma matricial

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} M_x \\ M_y \\ M_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -R_2 & -\Delta\omega & \omega_y \\ \Delta\omega & -R_2 & -\omega_x \\ -\omega_y & \omega_x & -R_1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} M_x \\ M_y \\ M_z \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ M_0 R_1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.6})$$

## Apêndice B

# Apêndice: Solução Analítica das Equações de Bloch

Partindo do apêndice A temos que o sistema diferencial das equações de Bloch pode ser escrito da forma:

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} M_x \\ M_y \\ M_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -R_2 & -\Delta\omega & \omega_y \\ \Delta\omega & -R_2 & -\omega_x \\ -\omega_y & \omega_x & -R_1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} M_x \\ M_y \\ M_z \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ M_0 R_1 \end{pmatrix}$$

Utilizando o método sugerido em [32], temos que o sistema diferencial das equações de Bloch pode ser escrito na forma:

$$\begin{pmatrix} \dot{M}_x \\ \dot{M}_y \\ \dot{M}_z \\ \dot{M}_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -R_2 & -\Delta\omega & \omega_y & 0 \\ \Delta\omega & -R_2 & -\omega_x & 0 \\ -\omega_y & \omega_x & -R_1 & R_1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} M_x \\ M_y \\ M_z \\ M_0 \end{pmatrix} \quad (\text{B.1})$$

onde  $M_0$  é a magnetização em o equilíbrio em a direção  $z$  que é definido como a unidade ( $M_0 \equiv 1$ ). Por simplicidade em a notação temos

$$\omega_1^2 = \omega_x^2 + \omega_y^2 = (\gamma B_1)^2,$$

também temos que  $R_i = \frac{1}{T_i}$ , onde  $i = 1, 2$ .

Seja  $\mathbb{A}$  a matriz dos coeficientes e  $\mathbf{M}$  o vector coluna  $(M_x, M_y, M_z, M_0)^T$  sendo  $T$  a transposta.

Então as equações de Bloch podem-se re-escrever em uma forma simplificada, isso é

$$\frac{d\mathbf{M}(t)}{dt} = \mathbb{A} \cdot \mathbf{M}(t). \quad (\text{B.2})$$

Destas equações formam um sistema de equações diferenciais de primeira ordem, pelo que se a matriz  $\mathbb{A}$  é constante num intervalo de tempo, então elas tem uma solução analítica em termos da exponencial da matriz com os estados iniciais dados

$$\mathbf{M}(t) = \mathbf{e}^{\mathbb{A}t} \mathbf{M}(0). \quad (\text{B.3})$$

Para os casos simples, é fácil calcular uma solução simbólica, mas para no caso completo vai ter alguns desafios. O abordagem padronizado e geral do calculo da matriz exponencial é obter primeiro os valores e vectores próprios da matriz. Os autovalores são calculados usando o polinômio caraterístico

$$p_{\mathbb{A}} = \det(\mathbb{A} - \lambda \mathbb{I}) = 0$$

obtendo

$$\begin{aligned} p_{\mathbb{A}} &= \lambda [\lambda^3 + (R_1 + 2R_2) \lambda^2 + (2R_1R_2 + R_2^2 + \omega_1^2 + \Delta\omega^2) \lambda + (R_1R_2^2 + R_2\omega_1^2 + R_1\Delta\omega^2)] \\ &= \lambda [a\lambda^3 + b\lambda^2 + c\lambda + d], \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

onde

$$a = 1 \quad (\text{B.5})$$

$$b = R_1 + 2R_2 \quad (\text{B.6})$$

$$c = 2R_1R_2 + R_2^2 + \omega_1^2 + \Delta\omega^2 \quad (\text{B.7})$$

$$d = R_1R_2^2 + R_2\omega_1^2 + R_1\Delta\omega^2 \quad (\text{B.8})$$

É evidente que o primeiro autovalor é zero e os outros três são as raízes do polinômio cúbico (solução em apêndice C). Construindo o vector de valores próprios obtemos  $\lambda = [\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4]^T$  para

$$\lambda_1 = \frac{E_1}{6} - 6\frac{E_2}{E_1} - \frac{1}{3}R_1 - \frac{2}{3}R_2 \quad (\text{B.9})$$

$$\lambda_2 = u_2 + iu_3 \quad (\text{B.10})$$

$$\lambda_3 = u_2 - iu_3 \quad (\text{B.11})$$

$$\lambda_4 = 0 \quad (\text{B.12})$$

na qual

$$E_1 = \sqrt[3]{8(R_2 - R_1)(9\Delta\omega^2 + (R_1 - R_2)^2) + 36(R_1 - R_2)\omega_1^2 + 12\sqrt{E_3}} \quad (\text{B.13})$$

$$E_2 = \frac{1}{3}(\Delta\omega^2 + \omega_1^2) - \frac{1}{9}(R_1 - R_2)^2 \quad (\text{B.14})$$

$$E_3 = 12(\Delta\omega^2 + \omega_1^2)^3 + 24(R_1 - R_2)^2 \left( \Delta\omega^2 - \frac{5 + 3\sqrt{3}}{4}\omega_1^2 \right) \times \\ \left( \Delta\omega^2 - \frac{5 - 3\sqrt{3}}{4}\omega_1^2 \right) + 12(R_1 - R_2)^4 \Delta\omega^2 \quad (\text{B.15})$$

$$u_2 = -\frac{E_1}{12} + \frac{3E_2}{E_1} - \frac{1}{3}R_1 - \frac{2}{3}R_2 \quad (\text{B.16})$$

$$u_3 = \frac{\sqrt{3}}{2} \left( \frac{E_1}{6} + 6\frac{E_2}{E_1} \right) \quad (\text{B.17})$$

Enquanto os autovalores da matriz  $\mathbb{A}$  sejam diferentes de acordo com o teorema dado em [32], temos

$$\mathbf{e}^{\mathbb{A}t} = \mathbf{e}^{\lambda_1 t} \frac{\mathbb{A} (\mathbb{A} - \lambda_2 \mathbb{I}) (\mathbb{A} - \lambda_3 \mathbb{I})}{\lambda_1 (\lambda_1 - \lambda_2) (\lambda_1 - \lambda_3)} + \operatorname{Re} \left[ \mathbf{e}^{\lambda_2 t} \frac{\mathbb{A} (\mathbb{A} - \lambda_1 \mathbb{I}) (\mathbb{A} - \lambda_3 \mathbb{I})}{\lambda_2 (\lambda_2 - \lambda_1) (\lambda_2 - \lambda_3)} + \right. \\ \left. \mathbf{e}^{\lambda_3 t} \frac{\mathbb{A} (\mathbb{A} - \lambda_1 \mathbb{I}) (\mathbb{A} - \lambda_2 \mathbb{I})}{\lambda_3 (\lambda_3 - \lambda_1) (\lambda_3 - \lambda_2)} \right] + \frac{(\mathbb{A} - \lambda_1 \mathbb{I}) (\mathbb{A} - \lambda_2 \mathbb{I}) (\mathbb{A} - \lambda_3 \mathbb{I})}{-\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3} \quad (\text{B.18})$$

$$\equiv \mathbf{e}^{\lambda_1 t} \mathbf{L}_1 (\mathbb{A}) + \operatorname{Re} \left[ \mathbf{e}^{\lambda_2 t} \mathbf{L}_2 (\mathbb{A}) + \mathbf{e}^{\lambda_3 t} \mathbf{L}_3 (\mathbb{A}) \right] + \mathbf{L}_4 (\mathbb{A})$$

onde  $\mathbb{I}$  é a matriz identidade de  $4 \times 4$  e é definido os coeficientes de interpolação de Lagrange ou também chamados operadores de projeção ou projetores  $\mathbf{L}_1 (\mathbb{A})$ ,  $\mathbf{L}_2 (\mathbb{A})$ ,  $\mathbf{L}_3 (\mathbb{A})$ ,  $\mathbf{L}_4 (\mathbb{A})$ .

A solução de  $\mathbf{e}^{\mathbb{A}t}$  pode-se ver como uma suma de três matrizes com entradas de números reais: uma matriz  $\mathbf{e}^{\lambda_1 t} \mathbf{L}_1 (\mathbb{A})$  que tem um decaimento  $\mathbf{e}^{\lambda_1 t}$ , outra matriz  $\operatorname{Re} \left[ \mathbf{e}^{\lambda_2 t} \mathbf{L}_2 (\mathbb{A}) + \mathbf{e}^{\lambda_3 t} \mathbf{L}_3 (\mathbb{A}) \right]$  com um decaimento  $\mathbf{e}^{u_2 t}$  e termos de oscilação  $\cos (u_3 t)$ ,  $\sin (u_3 t)$  e por último a matriz constante  $\mathbf{L}_4 (\mathbb{A})$ .

Eté aqui temos descrito o calculo das soluções de forma explicita das equações de Bloch, mas é muito complicado de manipular a solução geral pela quantidade de variáveis intermédias. Então, o que é proposto em [32] é calcular aproximações em primeiro e segundo ordem dos autovalores  $\lambda$  imediatamente após usamos estes valores para calcular (B.18). Com isso podemos ver que as aproximações tem expressões mais simples que as soluções exatas mais é possível obter expressões conhecidas para as interações entre a magnetização dos sistemas de spins e os pulsos aplicados.

Para no caso de nosso interesse usamos  $R_1 \leq R_2$  o que significa que  $T_1 \geq T_2$ , então as aproximações de primeiro e segundo ordem são

$$\lambda \approx \begin{bmatrix} -R_2 \\ -R_2 + i\sqrt{\Delta\omega^2 + \omega_1^2} \\ -R_2 - i\sqrt{\Delta\omega^2 + \omega_1^2} \\ 0 \end{bmatrix} \quad (\text{B.19})$$

$$\lambda \approx \begin{bmatrix} -\frac{\omega_1^2}{\Delta\omega^2+\omega_1^2}R_2 - \frac{\Delta\omega^2}{\Delta\omega^2+\omega_1^2}R_1 \\ -\frac{\omega_1^2-2\Delta\omega^2}{2(\Delta\omega^2+\omega_1^2)}R_2 - \frac{\omega_1^2}{2(\Delta\omega^2+\omega_1^2)}R_1 + i\sqrt{\Delta\omega^2+\omega_1^2} \\ -\frac{\omega_1^2-2\Delta\omega^2}{2(\Delta\omega^2+\omega_1^2)}R_2 - \frac{\omega_1^2}{2(\Delta\omega^2+\omega_1^2)}R_1 - i\sqrt{\Delta\omega^2+\omega_1^2} \\ 0 \end{bmatrix} \quad (\text{B.20})$$

respectivamente.

Como um caso particular faremos um teste da proposta com um exemplo muito conhecido, calculamos a solução das equações de Bloch em relaxação livre, isso é imediatamente depois da aplicação do pulso rf, por enquanto  $\omega_1 = 0$ , então temos:

$$\mathbb{A} = \begin{pmatrix} -R_2 & -\omega_0 & 0 & 0 \\ \omega_0 & -R_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -R_1 & R_1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \lambda = \begin{bmatrix} -R_1 \\ -R_2 + i\omega_0 \\ -R_2 - i\omega_0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{e}^{\lambda_1 t} \mathbf{L}_1(\mathbb{A}) = \mathbf{e}^{\lambda_1 t} \frac{\mathbb{A}(\mathbb{A} - \lambda_2 \mathbb{I})(\mathbb{A} - \lambda_3 \mathbb{I})}{\lambda_1(\lambda_1 - \lambda_2)(\lambda_1 - \lambda_3)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{e}^{-R_1 t} & -\mathbf{e}^{-R_1 t} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{e}^{\lambda_2 t} \mathbf{L}_2(\mathbb{A}) = \mathbf{e}^{\lambda_2 t} \frac{\mathbb{A}(\mathbb{A} - \lambda_1 \mathbb{I})(\mathbb{A} - \lambda_3 \mathbb{I})}{\lambda_2(\lambda_2 - \lambda_1)(\lambda_2 - \lambda_3)} = \mathbf{e}^{-R_2 t} \mathbf{e}^{i\omega_0 t} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{i}{2} & 0 & 0 \\ -\frac{i}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{e}^{\lambda_3 t} \mathbf{L}_3(\mathbb{A}) = \mathbf{e}^{\lambda_3 t} \frac{\mathbb{A}(\mathbb{A} - \lambda_1 \mathbb{I})(\mathbb{A} - \lambda_2 \mathbb{I})}{\lambda_3(\lambda_3 - \lambda_1)(\lambda_3 - \lambda_2)} = \mathbf{e}^{-R_2 t} \mathbf{e}^{-i\omega_0 t} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{i}{2} & 0 & 0 \\ \frac{i}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Para obter a parte real, fazemos:

$$\operatorname{Re}(\mathbf{e}^{\lambda_2 t} \mathbf{L}_2(\mathbb{A}) + \mathbf{e}^{\lambda_3 t} \mathbf{L}_3(\mathbb{A})) = e^{\lambda_2^r t} [(\mathbf{L}_2^r + \mathbf{L}_3^r) \cos(\lambda_2^i t) + (\mathbf{L}_3^i - \mathbf{L}_2^i) \sin(\lambda_2^i t)]$$

por que  $\lambda_2 = \lambda_2^r + \lambda_2^i$  e  $\lambda_3 = \lambda_3^r + \lambda_3^i$  onde  $\lambda_2^r = \lambda_3^r$  e  $\lambda_2^i = \lambda_3^i$ .

Por tanto

$$\operatorname{Re}(\mathbf{e}^{\lambda_2 t} \mathbf{L}_2(\mathbb{A}) + \mathbf{e}^{\lambda_3 t} \mathbf{L}_3(\mathbb{A})) = \begin{pmatrix} \mathbf{e}^{-R_2 t} \cos(\omega_0 t) & -\mathbf{e}^{-R_2 t} \sin(\omega_0 t) & 0 & 0 \\ \mathbf{e}^{-R_2 t} \sin(\omega_0 t) & \mathbf{e}^{-R_2 t} \cos(\omega_0 t) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{e}^{\lambda_4 t} \mathbf{L}_4(\mathbb{A}) = \frac{(\mathbb{A} - \lambda_1 \mathbb{I})(\mathbb{A} - \lambda_2 \mathbb{I})(\mathbb{A} - \lambda_3 \mathbb{I})}{-\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Finalmente usamos (B.3) e obtemos

$$\begin{pmatrix} M_x(t) \\ M_y(t) \\ M_z(t) \\ M_0(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-R_2 t} \cos(\omega_0 t) & -e^{-R_2 t} \sin(\omega_0 t) & 0 & 0 \\ e^{-R_2 t} \sin(\omega_0 t) & e^{-R_2 t} \cos(\omega_0 t) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-R_1 t} & 1 - e^{-R_1 t} \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} M_x(0) \\ M_y(0) \\ M_z(0) \\ M_0(0) \end{pmatrix}$$

$$M_x(t) = e^{-R_2 t} [M_x(0) \cos(\omega_0 t) - M_y(0) \sin(\omega_0 t)]$$

$$M_y(t) = e^{-R_2 t} [M_x(0) \sin(\omega_0 t) + M_y(0) \cos(\omega_0 t)] \quad (\text{B.21})$$

$$M_z(t) = M_z(0) e^{-R_1 t} + M_0(0) (1 - e^{-R_1 t}).$$

# Apêndice C

## Apêndice: Desenvolvimento de Relações Importantes

### C.1 Obtenção das Raízes de um Polinômio Cúbico

Consideremos um polinômio de grau três da forma mais geral, isso é

$$P(x) = ax^3 + bx^2 + cx + d \quad (\text{C.1})$$

Por definição temos que  $P(x) = 0$  tem três raízes ao sumo. Então a solução geral é:

$$x_1 = -\frac{b}{3a} + \frac{\sqrt[3]{\sqrt{(-27a^2d + 9abc - 2b^3)^2 + 4(3ac - b^2)^3} - 27a^2d + 9abc - 2b^3}}{3a\sqrt[3]{2}} - \frac{\sqrt[3]{2}(3ac - b^2)}{3a\sqrt[3]{\sqrt{(-27a^2d + 9abc - 2b^3)^2 + 4(3ac - b^2)^3} - 27a^2d + 9abc - 2b^3}} \quad (\text{C.2})$$

$$x_2 = -\frac{b}{3a} - \frac{(1 - i\sqrt{3}) \sqrt[3]{\sqrt{(-27a^2d + 9abc - 2b^3)^2 + 4(3ac - b^2)^3} - 27a^2d + 9abc - 2b^3}}{6\sqrt[3]{2}a} + \frac{(1 + i\sqrt{3})(3ac - b^2)}{3 \cdot 2^{2/3} a \sqrt[3]{\sqrt{(-27a^2d + 9abc - 2b^3)^2 + 4(3ac - b^2)^3} - 27a^2d + 9abc - 2b^3}} \quad (C.3)$$

$$x_3 = -\frac{b}{3a} - \frac{(1 + i\sqrt{3}) \sqrt[3]{\sqrt{(-27a^2d + 9abc - 2b^3)^2 + 4(3ac - b^2)^3} - 27a^2d + 9abc - 2b^3}}{6\sqrt[3]{2}a} + \frac{(1 - i\sqrt{3})(3ac - b^2)}{3 \cdot 2^{2/3} a \sqrt[3]{\sqrt{(-27a^2d + 9abc - 2b^3)^2 + 4(3ac - b^2)^3} - 27a^2d + 9abc - 2b^3}} \quad (C.4)$$

Onde nos usamos uma aproximação em primeiro e segundo ordem em  $x_i$ .

## C.2 Desenvolvimento dos Braket de Lie

Introduzindo os brackets de Lie para duas campos vectoriais  $X, Y$ , que são determinados pela relação

$$[X, Y]_j(q_i) = \sum_i \left( \frac{\partial Y_j}{\partial q_i} X_i - \frac{\partial X_j}{\partial q_i} Y_i \right) \quad (C.5)$$

Usando as definições e levando para nosso caso e arrumando as expressões, fazemos: Primeiro, temos duas componentes em cada vector  $n = 2 \Rightarrow q_i = (q_1, q_2)$ . Também temos  $\partial_i = \frac{\partial}{\partial q_i}$  e finalmente define-se que

$$X = \sum_i^n X_i \partial_i, \quad Y = \sum_i^n Y_i \partial_i$$

A relação geral fica

$$[X, Y] = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n (X_j \partial_j Y_i - Y_j \partial_j X_i) \partial_i. \quad (C.6)$$

Para  $n = 2$  temos

$$\begin{aligned} [X, Y] &= \sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^2 (X_j \partial_j Y_i - Y_j \partial_j X_i) \partial_i \\ &= \sum_{i=1}^2 [(X_1 \partial_1 Y_i - Y_1 \partial_1 X_i) \partial_i + (X_2 \partial_2 Y_i - Y_2 \partial_2 X_i) \partial_i] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} [X, Y] &= \sum_{i=1}^2 (X_1 \partial_1 Y_i - Y_1 \partial_1 X_i) \partial_i + \sum_{i=1}^2 (X_2 \partial_2 Y_i - Y_2 \partial_2 X_i) \partial_i \\ &= (X_1 \partial_1 Y_1 - Y_1 \partial_1 X_1) \partial_1 + (X_1 \partial_1 Y_2 - Y_1 \partial_1 X_2) \partial_2 + (X_2 \partial_2 Y_1 - Y_2 \partial_2 X_1) \partial_1 + \\ &\quad (X_2 \partial_2 Y_2 - Y_2 \partial_2 X_2) \partial_2 \\ &= (X_1 \partial_1 Y_1 - Y_1 \partial_1 X_1 + X_2 \partial_2 Y_1 - Y_2 \partial_2 X_1) \partial_1 + (X_1 \partial_1 Y_2 - Y_1 \partial_1 X_2 + \\ &\quad X_2 \partial_2 Y_2 - Y_2 \partial_2 X_2) \partial_2 \\ &= \left( X_1 \frac{\partial Y_1}{\partial q_1} - Y_1 \frac{\partial X_1}{\partial q_1} + X_2 \frac{\partial Y_1}{\partial q_2} - Y_2 \frac{\partial X_1}{\partial q_2} \right) \frac{\partial}{\partial q_1} + \\ &\quad \left( X_1 \frac{\partial Y_2}{\partial q_1} - Y_1 \frac{\partial X_2}{\partial q_1} + X_2 \frac{\partial Y_2}{\partial q_2} - Y_2 \frac{\partial X_2}{\partial q_2} \right) \frac{\partial}{\partial q_2}. \end{aligned}$$

Usando anterior igualdade, calculamos  $[\vec{F}_0, \vec{F}_1]$ ,  $[[\vec{F}_1, \vec{F}_0], \vec{F}_0]$ ,  $[[\vec{F}_1, \vec{F}_0], \vec{F}_1]$ .

Lembremos que usamos (3.17), onde  $\vec{F}_0 = (-\Gamma y, \gamma - \gamma z)$  e  $\vec{F}_1 = (-z, y)$ . Então obtemos:

$$[\vec{F}_0, \vec{F}_1] = (-\gamma + z\delta) \frac{\partial}{\partial y} + y\delta \frac{\partial}{\partial z} \quad (\text{C.7})$$

$$[[\vec{F}_1, \vec{F}_0], \vec{F}_0] = (\gamma(\gamma - 2\Gamma) - z\delta^2) \frac{\partial}{\partial y} + \delta^2 y \frac{\partial}{\partial z} \quad (\text{C.8})$$

$$[[\vec{F}_1, \vec{F}_0], \vec{F}_1] = 2y\delta \frac{\partial}{\partial y} + (\gamma - 2z\delta) \frac{\partial}{\partial z}. \quad (\text{C.9})$$

Onde fizemos  $\delta = \gamma - \Gamma$ .