En esta hoja vamos a estudiar la ecuación que controla la resonancia de los protones y además vamos a incorporar unos términos que tienen en cuenta los tiempos de relajación. Estos términos son más bien heurísticos y fueron introducida por F. Bloch en [Blo46] para producir en 1946 una ecuación que lleva su nombre, mucho antes de que nadie ensoñara las aplicaciones médicas (el propio interés de Bloch era la resonancia de los protones como fenómeno físico). Al mismo tiempo, con otros autores, comprobó en [BHP46] que cuadraba con los experimentos.

El artículo [HL83] contiene explicaciones del trabajo de Bloch y de otras cosas, ya con las aplicaciones a imágenes médicas en mente. Para mi gusto, es menos claro de lo que podría ser, e incluso en lo relativo a resolver la ecuación de Bloch me gusta más el original [Blo46].

Recuerda que la ecuación fundamental que regulaba el momento angular del protón desde el punto de vista clásico (lo que corresponde al espín con la perspectiva cuántica) era

$$(*) \qquad \frac{d\vec{L}}{dt} = \gamma \vec{L} \times \vec{B}$$

donde γ es la constante giromagnética, que depende de la relación carga-masa del protón. No pierdas de vista, y tenlo en mente frente a posibles preguntas del tribunal, que el modelo "de verdad" es cuántico y el momento angular de un protón solo puede tomar ciertos valores discretos. De todas formas, como hemos visto en la hoja anterior, la electrodinámica clásica predice resultados que son equiparables a los cuánticos. A la escala a la que funcionan las imágenes médicas, con precisiones comparables a un milímetro, es imposible notar ningún efecto cuántico. Hay ciertos misterios desde el punto de vista clásico, concretamente por qué la constante giromagnética tiene el valor que tiene y, a nivel más fundamental, por qué los protones se comportan como imanes. Pero podemos dar todo ello por supuesto y no salir de la electrodinámica clásica.

Si $\vec{B}$ era un campo magnético constante (originariamente en la dirección del eje Z), ya habíamos visto que se producía la precesión. Ahora lo que vamos a estudiar es qué ocurre si este campo es variable con la frecuencia de resonancia. Antes de nada, comprobemos que, sea cual sea $\vec{B}$, la ecuación (*) implica una ley de conservación: el momento angular puede cambiar de dirección pero no de tamaño. Con la interpretación clásica del espín como giro, esto significa que no es posible hacer que el protón gire más deprisa.

1) Derivando $\|\vec{L}\|^2$ demuestra que para cualquier solución de (*) se tiene $\|\vec{L}(t)\| = \|\vec{L}(0)\|$.

Consideramos un campo magnético variable con oscilaciones armónicas en las dos primeras coordenadas:

$$\vec{B} = \big(B_1 \cos(\omega t), B_1 \operatorname{sen}(\omega t), B_0\big).$$

La idea es que B_1 sea pequeño en comparación con B_0. Es decir, fundamentalmente seguimos teniendo un campo magnético en la dirección del eje Z pero ahora hay una ligeras oscilaciones periódicas en el plano XY. En la máquina de resonancias, B_0 viene producido por el imán principal y los términos oscilatorios, por radio frecuencia.

2) Prueba que para este $\vec{B}$ la ecuación (*) equivale a

$$\frac{d\vec{L}}{dt} = A(t)\vec{L} \qquad \text{con} \quad A(t) = \gamma \begin{pmatrix} 0 & B_0 & -B_1 \operatorname{sen}(\omega t) \\ -B_0 & 0 & B_1 \cos(\omega t) \\ B_1 \operatorname{sen}(\omega t) & -B_1 \cos(\omega t) & 0 \end{pmatrix}.$$

Ahora surge un problema curioso de ecuaciones diferenciales ordinarias, que es muy posible que nunca te hayan contado. Aparentemente, por derivación directa, para cualquier matriz cuadrada $A = A(t)$

$$\vec{y} = \exp\Big(\int_0^t A(u)\, du\Big)\vec{y}(0) \quad \overset{?}{\Longrightarrow} \quad \frac{d}{dt}\vec{y} = A\vec{y}$$

donde la integral de la matriz es elemento a elemento y supongo que conoces qué significa la exponencial de una matriz. Esto permitiría resolver cualquier sistema lineal de ecuaciones diferenciales de primer orden. Sin embargo esta implicación, con la que uno lograría engañar a más de un profesor, es falsa. Funciona cuando $A(t)A(s) = A(s)A(t)$, para todo t y s, en particular si A es constante o si la dimensión es 1, pero, en general, no en otros casos.

3) [opcional] ¿Por qué la derivada $\exp\Big(\int_0^t A(u)\, du\Big)$ no es $A(t)\exp\Big(\int_0^t A(u)\, du\Big)$, en general, como ocurre cuando A es una función $\mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$?

Para solventar este problema en nuestro caso vamos a hacer un cambio de variable

$$\vec{L} = C(t)\vec{V} \qquad \text{con} \quad C(t) = \begin{pmatrix} \cos(\omega t) & -\operatorname{sen}(\omega t) & 0 \\ \operatorname{sen}(\omega t) & \cos(\omega t) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Esto es un giro de ángulo variable. La idea es que si el vector $\vec{B}$ está girando y nosotros giramos a la misma velocidad, nos parecerá que está quieto.

4) Comprueba que con el cambio de variable anterior la ecuación es

$$\frac{d\vec{V}}{dt} = \big(-C(-t)C'(t) + C(-t)A(t)C(t)\big)\vec{V}.$$

Para ello necesitarás explicar por que $C(-t)$ es la inversa de $C(t)$.

5) Muestra que

$$-C(-t)C'(t) + C(-t)A(t)C(t) = D \qquad \text{con} \quad D = \begin{pmatrix} 0 & \omega + \gamma B_0 & 0 \\ -\omega - \gamma B_0 & 0 & \gamma B_1 \\ 0 & -\gamma B_1 & 0 \end{pmatrix}$$

y se tiene $\vec{V}(t) = \exp(Dt)\vec{V}(0)$.

Lo importante del cambio de variable anterior es que consigue que D sea constante, independiente de t.

En el resto de la hoja vamos a ocuparnos del caso de resonancia $\omega = -\omega_0$ con ω_0 la frecuencia angular[1] de Larmor, $\omega_0 = \gamma B_0$, lo que simplifica D. El signo negativo en ω solo indica un sentido de giro.

6) Demuestra (siempre en el caso de la resonancia) que

$$\exp(Dt) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(\omega_1 t) & \operatorname{sen}(\omega_1 t) \\ 0 & -\operatorname{sen}(\omega_1 t) & \cos(\omega_1 t) \end{pmatrix} \qquad \text{con} \quad \omega_1 = \gamma B_1.$$

Concluye que la solución general de (*) para nuestro $\vec{B}$ es

$$\vec{L}(t) = \begin{pmatrix} \cos(\omega_0 t) & \operatorname{sen}(\omega_0 t) & 0 \\ -\operatorname{sen}(\omega_0 t) & \cos(\omega_0 t) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(\omega_1 t) & \operatorname{sen}(\omega_1 t) \\ 0 & -\operatorname{sen}(\omega_1 t) & \cos(\omega_1 t) \end{pmatrix} \vec{L}(0).$$

De acuerdo con nuestra hipótesis, ω_1 es mucho menor que ω_0. Así tenemos en general un giro rápido alrededor de un eje (inicialmente, el eje Z) que a su vez se va moviendo, en comparación, lentamente. Solo hay una solución en la que ese giro lento del eje no se manifiesta.

7) Comprueba que $\vec{L}(t) = \big(\cos(\omega_0 t), -\operatorname{sen}(\omega_0 t), 0\big)$ es solución de (*).

Por lo que has estudiado del esquema básico de las resonancias magnéticas, sabes que esta solución corresponde al caso en que se hace resonar al protón, pero la teoría anterior muestra que es solo un caso particular. Con una condición inicial $\vec{L}(0)$ que no estuviera en el plano XY siempre aparecería el giro lento del eje.

8) Partiendo por ejemplo de $\vec{L}(0) = (1, 1, 0)$ con $\omega_0 = 1$ y $\omega_1 = 1/20$, utiliza tu *software* favorito para pintar la curva que describe $\big(L_1(t), L_2(t)\big)$ cuando $t \in [0, T]$ con $\vec{L} = (L_1, L_2, L_3)$ la solución de (*). Experimenta con varios valores de T de la forma $2\pi k$ y quizá también con otras condiciones iniciales

En diversos modelos matemáticos se establece que la variación de cierta cantidad es proporcional a la diferencia con cierta valor de equilibrio. Si la constante de proporcionalidad es negativa, el modelo mostrará una resistencia a separarse del valor de equilibrio y, en ausencia de otras acciones, tenderá a la larga a él.

[1] Por si no lo tienes claro, la frecuencia ν se mide en número de vueltas por unidad de tiempo y la frecuencia angular ω en número de radianes por unidad de tiempo. Por tanto $\omega = 2\pi\nu$.

9) Sea $y = y(t)$ una solución de $y' = -\kappa(y - \ell)$, donde $\kappa > 0$ y $\ell \in \mathbb{R}$. Demuestra que sea cual sea el valor inicial $y(0)$, se tiene que $y(t) \to \ell$ cuando $t \to +\infty$. En este sentido, ℓ es el valor de equilibrio. Muestra también que $\kappa^{-1} \log 2$ es el tiempo que debe transcurrir para que y adquiera un valor a medio camino entre $y(0)$ y ℓ (supuestos distintos).

En el contexto de las desintegraciones radiactivas, se diría que $\kappa^{-1} \log 2$ es la vida media.

En el caso de las resonancias magnéticas, hay una interacción entre un protón y los núcleos del resto de los átomos que provoca cierta resistencia a que el espín de una zona localizada de los núcleos atómicos de hidrógeno deje de estar alineado con el campo magnético principal $(0, 0, B_0)$. Con esta idea en mente, Bloch consideró que en vez de (*), la ecuación realista debía añadir un término en cada componente como el $-\kappa(y - \ell)$ del ejercicio anterior, donde $\ell = 0$ para las dos primeras coordenadas. De esta forma se llega a la *ecuación de Bloch*:

$$\frac{d\vec{L}}{dt} = \gamma \vec{L} \times \vec{B} + \big(-\beta L_1, -\beta L_2, -\alpha(L_3 - L_{30})\big).$$

Aquí L_{30} es el valor de la tercera coordenada del momento angular inicial (en teoría, para Bloch, incluso antes de conectar el campo variable). La constantes α y β son distintas por dos tipos de interacciones (por si lo has visto en los vídeos o lo lees en [HL83], son espín-retículo y espín-espín, respectivamente). Aquí no nos preocuparemos demasiado por estas interacciones y consideraremos la ecuación como lo que es, un modelo teórico razonable que funciona bien en la práctica. El primer término tiene unidades de momento angular entre tiempo, por tanto α y β tienen unidades de inversos de tiempo, lo que motiva definir los *tiempos de relajación*

$$T_1 = \alpha^{-1} \qquad \text{y} \qquad T_2 = \beta^{-1}.$$

La ecuación original (*) corresponde a $T_1 = T_2 = \infty$. Fuera de este caso, deja de ser cierto que $\|\vec{L}\|$ se conserve.

Ahora vamos a hacer un pequeño análisis teórico de la evolución a la larga de las soluciones. Para simplificar, vamos a considerar el caso $T_1 < \infty$, $T_2 = \infty$ (que no es muy realista porque en la práctica α es menor que β).

10) Haz el cambio $\vec{L} = C(t)\vec{V}$ que habíamos visto antes en la ecuación de Bloch con $\beta = 0$ en el caso de resonancia $\omega = -\omega_0$ y muestra que se reduce a

$$(**) \qquad \frac{d\vec{V}}{dt} = \big(0, \gamma B_1 V_3, -\gamma B_1 V_2 - \alpha(V_3 - L_{30})\big).$$

En particular, V_1 es constante.

Es posible aprovechar lo anterior para que prácticamente no haya que hacer ningún cálculo.

11) Comprueba que los autovalores de la aplicación lineal

$$(V_2, V_3) \mapsto \big(\gamma B_1 V_3, -\gamma B_1 V_2 - \alpha V_3\big)$$

tienen parte real negativa. Explica por qué esto implica que todas las soluciones de

$$\frac{d(V_2, V_3)}{dt} = \big(\gamma B_1 V_3, -\gamma B_1 V_2 - \alpha V_3\big)$$

cumplen $V_2(t), V_3(t) \to 0$ cuando $t \to \infty$.

12) Con lo que has aprendido en el ejercicio anterior, muestra que cualquier solución de (**) cumple $V_3(t) \to 0$ y $V_2(t) \to \alpha L_{30}/(\gamma B_1)$. Concluye, que a la larga la solución de la ecuación de Bloch bajo las hipótesis anteriores ($\beta = 0$, $\omega = -\omega_0$) tiende a ser un vector $\vec{L}$ que gira con velocidad angular ω_0 en el plano XY.

El caso $\beta > 0$ se trata de forma parecida y aunque en este caso no se cumple que $\vec{L}$ tienda a estar constreñido al plano XY, sí es cierto que, bajo las condiciones numéricas prácticas, su tercera coordenada es mucho más pequeña que su la norma límite de $\|\vec{L}\|$. En la próxima hoja estudiaremos algunas de estas soluciones computacionalmente.

Tarea a entregar. Escribe un documento que combine los ejercicios anteriores. La hoja de la precesión de Larmor era una parte importante de tu trabajo y esta, como continuación suya, también lo es porque aparecen por fin las consecuencias matemáticas de la resonancia. No escatimes explicaciones e incluye alguna de las gráficas que se piden en uno de los ejercicios. Recuerda que en `http://matematicas.uam.es/~fernando.chamizo/supervision/TFG/enlaces.html` tienes una plantilla para incluir figuras y código en LaTeX.

Una extensión de unas seis páginas me parece adecuada pero no lo tomes en absoluto como una imposición.

Referencias

[BHP46] F. Bloch, W. W. Hansen, and M. Packard. The nuclear induction experiment. *Phys. Rev.*, 70:474–485, Oct 1946.

[Blo46] F. Bloch. Nuclear induction. *Phys. Rev.*, 70:460–474, Oct 1946.

[HL83] W. S. Hinshaw and A. H. Lent. An introduction to NMR imaging: From the Bloch equation to the imaging equation. *Proceedings of the IEEE*, 71(3):338–350, 1983.