

Ydinspinien tarkka kääntäminen magneettisella pulssimuotokytkenällä

Santra Uusitalo

Perustieteiden korkeakoulu

Kandidaatintyö
Espoo 1.8.2023

Vastuuopettaja

Prof. Nuutti Hyvönen

Työn ohjaaja

Koos Zevenhoven



**Aalto-yliopisto
Perustieteiden
korkeakoulu**

Copyright © 2023 Santra Uusitalo

The document can be stored and made available to the public on the open internet pages of Aalto University.
All other rights are reserved.

Tekijä Santra Uusitalo

Työn nimi Ydinspinien tarkka kääntäminen magneettisella pulssimuotokytkennällä

Koulutusohjelma Teknistieteellinen kandidaattiohjelma

Pääaine Matematiikka ja systeemitieteet **Pääaineen koodi** SCI3029

Vastuuopettaja Prof. Nuutti Hyvönen

Työn ohjaaja Koos Zevenhoven

Päivämäärä 1.8.2023 **Sivumäärä** 35+1 **Kieli** Suomi

Tiivistelmä

Magneettikuvaus (MRI) perustuu kudoksen ydinmagnetisaatioiden pyörimisestä syntyvään signaaliin. Magnetisaatioita voidaan saattaa pyörimään kääntämällä niitä ulkoisen magneettikentän avulla. Magnetisaatioiden kääntäminen suoritetaan yleensä useamman staattisen tai muuttuvan magneettikentän yhdistelmänä.

Yleensä magneettikuvaus sisältää 90 astetta magnetisaatioita kääntävän magneettisen pulssin ja yhden tai useamman magnetisaatioita 180 astetta kääntävän magneettisen pulssin. Näiden lisäksi kuvauksessa käytetään muita, staattisia tai hitaasti muuttuvia kenttiä. Magnetisaatioita 90 ja 180 astetta kääntävät pulssit suoritetaan yleensä peräkkäin. 90 astetta magnetisaatioita kääntävällä pulssilla luodaan signaali poikkeuttamalla magnetisaatiot staattisesta kentästä. Tämän jälkeen magnetisaatioiden liikkeeseen syntyy kuitenkin vaihe-eroa, jota korjataan yhdellä tai useammalla magnetisaatioita 180 astetta kääntävällä pulssilla. Näin tuotetaan uusia signaalin maksimikohtia, joilla voidaan luoda tarkempi kuva.

Tässä työssä esitellään tapa luoda 90 ja 180 astetta magnetisaatioita kääntävät pulssit MEG-MRI-laitteistoon. MEG-MRI-laitteistoa kehitetään Aalto-yliopiston Neurotieteen ja lääketieteellisen tekniikan laitoksella, ja se on magneettikuvauslaite, joka yhdistää magnetoencefalografiaa (MEG) ja ultramatalan kentän magneettikuvausta (ULF-MRI). Laitteen avulla voidaan samalla kuvauskerralla kuvata aivojen rakenne ja toiminta samassa koordinaatistossa, mikä voisi tuottaa nykyistä tarkempia kuvia.

90 ja 180 astetta magnetisaatioita kääntävät pulssit tuotettiin työn osana tehdyn optimointikoodin perusteella. Optimoinnissa yksinkertaisella teoreettisella mallilla kuvattua magnetisaation liikettä verrattiin koodin tuottaman pulssin synnyttämään magnetisaation liikkeeseen. Nämä kahdet eri magnetisaatiot pyrittiin saamaan mahdollimman tarkasti samaan orientaatioon.

Työssä oli tavoitteena luoda mahdollisimman tarkasti haluttuun suuntaan magnetisaatioita kääntäviä pulseja. Pulssien halutaan olevan amplitudiltaan mahdollisimman pieniä, enintään 100 mikrotaslaa, ja mahdollisimman lyhyitä, enintään 5 millisekuntia. Työssä luodut 90 astetta magnetisaatioita kääntävät pulssit toimivat hyvin ja kääntävät magnetisaatioita tarkasti, alle puolen asteen tarkkuuteen ideaalista suunnasta. Pulssien maksimiamplitudit ovat myös hyvin alhaiset, alle 20 mikrotaslaa ja pulssit soveltuvat tältä osalta MEG-MRI-laitteistoon. Pulssit ovat kestoltaan 5 millisekuntia.

180 astetta magnetisaatioita kääntävät pulssit ovat epätarkempia, ja tarvitsevat

jatkokehitystä. Valitut esimerkipulssit kääntävät magnetisaatioita alle asteen tarkkuuteen optimista. Pulssien amplitudit pysyvät alle sadassa mikrotessla, missään noin 72 mikrotesslaa, mikä tekee pulsseista soveltuvat MEG-MRI-laitteistoon maksimiampitudin kannalta. Myös magnetisaatioita 180 astetta kääntävät pulssit ovat kestoaltaan 5 millisekuntia. Laskenta-aika ja -teho ovat rajoittavana tekijänä pulsseja luovan algoritmin soveltamiseen monimutkaisempaan ja realistisempaan lähtötilanteeseen.

Avainsanat magneettikuvaus, magnetoenkefalografia, dynaaminen pulssimuotokytkenä

Author	Santra Uusitalo	
Title	Precise flipping of nuclear spins with magnetic pulse sequences	
Degree programme	Bachelor's Programme in Science and Technology	
Major	Mathematics and Systems Sciences	Code of major SCI3029
Teacher in charge	Prof. Nuutti Hyvönen	
Advisor	Koos Zevenhoven	
Date	Number of pages	Language
1.8.2023	35+1	Finnish

Abstract

Magnetic resonance imaging (MRI) uses a signal from the rotation of nuclear magnetisations in tissue to reconstruct an image. Magnetisations can be flipped with an external magnetic field. Flipping of magnetisations is done with a combination of static and varying magnetic fields.

Usually MRI contains a pulse turning magnetisations by 90 degrees, and one or more pulses that flip magnetisations by 180 degrees. In addition, other static or slowly varying fields are used during the imaging process. The pulses turning magnetisations 90 and 180 degrees are performed sequentially. With the magnetic pulse turning magnetisations by 90 degrees, a signal is created by deflecting magnetisations from the orientation of a static field. After this, the magnetisations dephase, which is corrected by flipping magnetisations once or multiple times by 180 degrees. This will create a new signal maximum and ensure a better image resolution.

In this thesis a method for creating the pulses flipping magnetisations by 90 or 180 degrees is introduced. The goal is to create pulses suitable for the MEG-MRI device at the Department of Neuroscience and Biomedical Engineering at Aalto University. The device combines magnetoencephalography (MEG) and ultra-low-field magnetic resonance imaging (ULF-MRI), and could provide a way to study the structure and function of the human brain simultaneously in the same coordinate system, creating more accurate images than those already existing.

The pulses flipping magnetisation by 90 and 180 degrees were constructed with a code programmed as a part of this thesis. A simple theoretical model was created to calculate the ideal orientation of the magnetisations and the optimisation was conducted by comparing these magnetisations to ones flipped with a pulse created by the algorithm. The goal is to get the orientation of the magnetisations flipped with a pulse to match the ideal orientation as closely as possible.

The goal of this work was to construct pulses that flip magnetisations as precisely as possible. An additional objective was to have the amplitudes of the pulses be as low as possible, 100 microtesla at maximum, and as short as possible, 5 milliseconds at maximum. The pulses that flip the magnetisations by 90 degrees created for this thesis work well and turn magnetisations precisely, less than half a degree from the ideal magnetisations. The maximum amplitudes of these pulses are low, less than 20 microtesla and the pulses are suitable for the MEG-MRI device in this sense. The duration of the pulses was 5 milliseconds.

The pulses turning magnetisations by 180 degrees are less precise and require

further development. The example pulses flip magnetisations to less than one degree from the ideal orientation. The amplitudes of these pulses remain under 100 microtesla, with the maximum at about 72 microtesla, which makes these pulses applicable to the MEG-MRI device with regards to the amplitude. The pulses are also 5 milliseconds in duration. Computation time and power are a limiting factor in applying the algorithm to more complicated and realistic cases.

Keywords magnetic resonance imaging, magnetoencephalography, DynaCAN

Sisällys

Tiivistelmä	3
Tiivistelmä (englanniksi)	5
Sisällys	7
1 Johdanto	8
2 Tausta	10
2.1 Magneettikuvaus (MRI)	10
2.2 Prekessio ja Blochin yhtälö	11
2.3 Relaksaatio	12
2.4 Spinien kääntäminen pulsseilla	14
2.5 Magnetisaatio taipuvassa koordinaatistossa	16
2.6 Dynaaminen pulssimuotokytkentä (DynaCAN)	17
3 Menetelmät ja optimointitehtävän määrittely	18
3.1 Magnetisaatioita 90 astetta kääntävän pulssin suunnittelu	18
3.2 Magnetisaatioita 180 astetta kääntävän pulssin suunnittelu	20
4 Tulokset	22
4.1 90 astetta magnetisaatioita kääntävät pulssit	22
4.2 90 astetta magnetisaatioita kääntävien pulssien tarkastelu	25
4.3 180 astetta magnetisaatioita kääntävät pulssit	26
4.4 180 astetta magnetisaatioita kääntävien pulssien tarkastelu	28
5 Pohdinnat	32

1 Johdanto

Aivojen tutkimus on verrattain uusi tieteenala, ja aivojen toiminnan tutkimus on vielä lähtökuopissaan [1]. Tästä johtuen tietämys aivoista on vielä vähäistä. Aivojen paremmalla tuntemisella olisi merkittäviä vaikutuksia lääketieteen saralla, sillä monien aivoihin liittyvien sairauksien tai toiminnallisten häiriöiden syntymekanismit ja ilmentymät eivät ole vielä tiedossa. Aivojen toimintahäiriöt ja sairaudet ovat suuri taakka yksittäisen ihmisen lisäksi myös kansanterveydelle ja -taloudelle. Vuonna 2001 Euroopassa sairauksien terveydelle kohdistamasta taakasta jopa 35 prosenttia johtui aivojen toimintahäiriöistä ja sairauksista [2].

Hoitomekanismien ja toimivan lääkeytyksen löytämiseksi tarvitaan paljon perustutkimusta. Aalto-yliopiston Neurotieteen ja lääketieteellisen tekniikan laitoksella on käynnissä useita aivojen rakenteelliseen ja toiminnalliseen kuvaukseen liittyviä tutkimusprojekteja. MEG-MRI-tutkimusryhmässä aivojen fysiologista kuvantamista lähestytään yhdistämällä ultramatalan magneettikentän (engl. ultra-low-field MRI, ULF-MRI) magneettikuvauslaite magnetoenkefalografiaa (MEG) mittaavaan laitteeseen. Siinä missä magneettikuvauksessa saadaan tarkka kuva aivojen kolmiulotteisesta rakenteesta, MEG-laitteella pystytään paikantamaan ja seuraamaan aivojen sähköistä toimintaa [3].

Kahden kuvauslaitteen yhdistäminen vaatii kuitenkin laitteiden adaptointia toisiinsa, sillä voimakkaat magneettikentät ja niiden jälki-ilmiöt häiritsevät varsinkin MEG-mittausta ja vääristävät signaalia [4]. Tämän takia kehitteillä on ultramatalaa magneettikenttää hyödyntävä ULF-MRI-laite, johon MEG-tyylisiä antureita voitaisiin yhdistää.

MRI-laitteeseen yhdistetyn MEG-laitteen takia ei kuitenkaan voida käyttää tavallisia magneettikuvauksessa käytettäviä magneettisia pulsseja [5]. Tämän kandidaattityön tavoitteena on luoda MEG-MRI-laitteeseen sopivia magneettisten pulssien aikamuotoja, joilla voidaan kääntää aivokudosten ydinmagnetisaatioita halutuilla kulmilla. Magneettikuvaus itsessään perustuu siihen, että ydinmagnetisaatioita voidaan manipuloida magneettisten pulssien avulla. Sopivilla pulsseilla magnetisaatioita voidaan kääntää esimerkiksi 90 tai 180 astetta haluttuun suuntaan.

Tavallinen pulssisekvenssi sisältää useamman pulssin sarjan, jossa magnetisaatioita käännetään toistuvasti eri suuntiin signaalin tuottamiseksi. Tässä työssä luodaan kaksi koodia, jotka tuottavat 90 ja 180 astetta magnetisaatioita kääntävät magneettiset pulssit. 90 astetta magnetisaatioita kääntävä pulssi kääntää magnetisaatioita z -akselilta x -akselille, jolloin muodostuu vaimeneva signaali. 180 astetta magnetisaatioita kääntävän pulssin tarkoituksena on tuottaa kaiku eli uusi signaalin maksimikohta. Näin voidaan muodostaa signaali-kohina-suhteeltaan tarkempi kuva, mikä on laitteen käytön kannalta erittäin tärkeää.

Pulssimuodot on luoto käyttäen dynaamista pulssimuotokytettä (DynaCAN, Dynamical Coupling for Additional dimensioNs [6]). Magneettikuvauksessa magnetisaatioita kääntävien virituspulssien lisäksi magnetisaatioita manipuloidaan näitä pulsseja ennen ja niiden jälkeen muilla magneettikentillä. Yleensä nämä muut kentät pitää kytkeä pois virituspulssien ajaksi, jotta ne eivät häiritse haluttua magnetisaation liikettä. DynaCAN:illa voidaan luoda magneettinen pulssimuoto niin, että muut

magneettikentät voidaan pitää päällä koko pulssimuotokytkennän ajan [6]. Metodien avulla tehty pulssimuoto kääntää magnetisaatioita tietyn kulman kumoten samalla muiden kenttien vaikutukset.

Työssä luodut magneettipulssit on toteuttu työn osana luodun Python-koodin avulla. Työssä käytetään hyväksi myös Python-kielistä Blochsimu-pakettia, jonka avulla ydinmagnetisaation liikettä simuloidaan yksinkertaistetun teoreettisen mallin pohjalta [7]. Optimointiongelma rakentuu minimointiongelmaksi näiden yksinkertaisen teoreettisen mallin pohjalta simuloitujen magnetisaatioiden ja optimointialgoritmin tuottaman pulssin mukaan mallinnettujen magnetisaatioiden erosta. Työssä siis yritetään löytää pulssi, jolla näiden kahden magnetisaatioiden välinen ero on mahdollisimman pieni.

Työ alkaa perehtymällä magneettikuvauksen teoreettiseen taustaan kappaleessa 2. Tässä kappaleessa pyritään myös esittelemään työn matemaattinen perusta ja relevanttia kirjallisuutta työn aiheesta. Kappaleessa 2 esiteltyt konseptit kulmineituvat optimointitehtävän määrittelyyn ja työssä käytettyihin menetelmiin kappaleessa 3. Työn tuloksia esitellään ja kuvaillaan kappaleessa 4 niiden keston, voimakkuuden ja tarkkuuden perusteella. Tuloksista vedetyt johtopäätökset ja työn tärkeimmät teemat kootaan kappaleessa 5.

2 Tausta

2.1 Magneettikuvaus (MRI)

Magneettikuvaus (engl. magnetic resonance imaging, MRI), on tapa kuvata tutkimuskohdetta sen magneettisten ominaisuuksien avulla. MRI:tä käytetään eniten lääketieteelliseen kuvantamiseen, sillä se on potilaaseen kajoamaton kuvantamiskeino ja turvallisempaa kuin röntgenkuvantaminen.

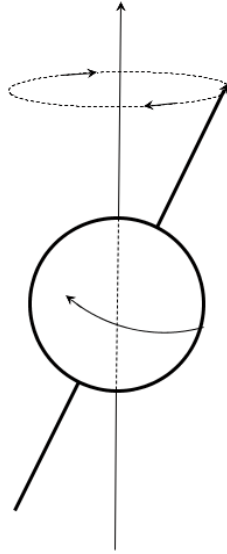
Tällä hetkellä laajimmin käytössä on korkean magneettikentän magneettikuvaus, jossa on viime vuosina saavutettu jopa seitsemän teslan vahvuisia staattisia magneettikenttiä. Korkeammassa magneettikentässä kuvauksen hyötyjä ovat parempi sensitiivisyys signaalille ja siitä seuraava korkea resoluutio lopullisessa kuvassa. Parempi resoluutio mahdollistaa pienempien ja monimutkaisempien rakenteiden kuvantamisen sekä heikompien fysiologisten reaktioiden tunnistamisen. [8]

Tavanomaisen MRI:n käytössä on kuitenkin huonojakin puolia. Korkeamman magneettikentän synnyttäminen ja kuvanlaadun varmistaminen vaativat jokseenkin monimutkaisen ja kalliin käämijärjestelmän, mikä on laitteen kaupallistamisen kannalta epäedullista [9]. Lämpileikkaukseltaan pienempi kela synnyttää vahvemman magneettikentän, minkä takia korkean magneettikentän kuvauksessa laitteet suunnitellaan melko ahtaiksi. Tämä rajoittaa puolestaan laitteen geometrisia ominaisuuksia. Tämän lisäksi korkeamman magneettikentän synnyttämisestä syntyy enemmän äänihaittaa kuin matalammasta magneettikentästä. Korkean kentän magneettikuvaus ei myöskään sovellu metallia sisältävien kohteiden, kuten tahdistimia käyttävien potilaiden kuvantamiseen, sillä metallin aiheuttamat häiriöt magneettikentässä saattavat vääristää signaalia ja metalliosat voivat myös lämmentä muuttuvien magneettikenttien seuraksena [10].

Ultramatalan magneettikentän magneettikuvauksessa (ULF-MRI) staattisen kentän voimakkuus on yleensä 50–250 mikrotesslaa, mikä on maan magneettikentän suuruusluokkaa [5]. ULF-MRI ja varsinkin MEG-laitteisto on herkempi magneettikentän häiriöille, minkä takia mittaustaliteisto ja sen ympäristö pitää suojata ulkoisilta magneettikentiltä. Laitteissa käytetään yleensä ohuilla μ -metallikerroksilla vuorattua suojahuonetta. μ -metalli on raudan ja nikkelin seos, joka korkean permeabiliteettinsa takia ohjaa ulkoisen magneettikentän huoneen ulkopuolelle. Tämän lisäksi huoneessa käytetään alumiinivuorausta, joka puolestaan hyvän sähkönjohtavuutensa takia mahdollistaa ulkoista magneettikenttää vastakkaisia kenttiä synnyttävien pyörrevirtojen muodostumisen, ja näin suojaa laitteistoa ulkoisilta magneettikentiltä. [11]

Vaikka kalliimmasta suojahuoneesta syntyy enemmän kustannuksia kuin vastaavasta asetelmasta korkean kentän MRI-laitteelle, säästetään matalan kentän magneettikuvauksessa kentän luomisessa. Laitteen käyttö on myös hiljaista ja laite voidaan valmistaa geometrialtaan avoimemmaksi kuin tavallinen MRI-laite, mikä mahdollistaa esimerkiksi ahtaanpaikankammoisten tai ääniherkkien potilaiden kuvauksen [12]. Tämän lisäksi magneettikentän heikkoudesta johtuen laitteella voidaan kuvata myös metallia sisältäviä kohteita [13].

Näiden hyötyjen lisäksi mielenkiintoinen kehityskohde on MEG-laitteen ja ULF-MRI-laitteen yhdistäminen. Laitteiden yhdistäminen ja kuvien muodostaminen



Kuva 1: Havainnollistus prekessiosta. Spinin pyörimisakseli pyörii ulkoisen magneettikentän ympäri.

samanaikaisesti sekä nopeuttaisi kuvausta että tarkentaisi sitä. Tämä johtuu siitä, että yhdistelmälaitteessa kuvat saataisiin asetettua tarkasti samaan koordinaatistoon [14]. Tämän hetken käytäntö on ottaa kuvat erikseen eri laitteilla, mikä on hidasta ja epätarkkaa.

2.2 Prekessio ja Blochin yhtälö

Ydinspinin muodostavat ympärilleen magneettikentän [15]. Tämän kenttäkuvion asentoa kuvaa magneettinen dipolimomentti [16]. MRI:ssä keskeinen käsite on magnetisaatio, magneettisen dipolimomentin tilavuustiheys [15].

Ulkoisessa magneettikentässä magneettinen dipolimomentti pyrkii tämän magneettikentän suuntaiseksi. Ydinspinin kvanttimekaanisesta luonteesta johtuen magneettinen momentti ei kuitenkaan suuntaudu magneettikentän suuntaiseksi, vaan pyörii ulkoisen magneettikentän ympäri. Tätä ilmiötä kutsutaan ytimen prekessioksi. Kuvassa 1 on havainnollistettu ytimen käyttäytymistä ulkoisessa magneettikentässä.

Prekessiokulmataajuutta, jolla momenttivektori pyörii ulkoisen magneettikentän \vec{B}_0 ympäri, kutsutaan Larmor-taajuudeksi ω_0 . [16]

$$\omega_0 = \gamma B_0, \quad (1)$$

missä γ on gyromagneettinen suhde, joka on jokaiselle ydintyypille ominainen kerroin. Vedyn tapauksessa sen ytimelle, eli protonille, $\gamma/2\pi = 42,58$ MHz/T. Koska B_0 pidetään staattisena koko mittauksen ajan, laboratoriokoordinaatisto asetetaan niin, että z -akseli on tämän magneettikentän suuntaisesti, eli

$$\vec{B}_0 = B_0 \hat{e}_z. \quad (2)$$

Koska yhtälön (1) mukaisesti prekessiotaaajuus riippuu ulkoisesta magneettikentästä, voidaan paikan suhteen muuttuvan magneettikentän, niin kutsutun gradienttikentän, avulla saavuttaa eri prekessiotaaajuuksia hiukkasen paikasta riippuen. Tästä taajuusjakaumasta saadaan magneettikuvan kolmiulotteinen paikkainformaatio kuvauksen päätteeksi. [17]

Magnetisaation aikakehitys magneettikentässä saadaan Blochin yhtälöstä, joka on yksinkertaisimmillaan

$$\frac{d\vec{M}}{dt} = \gamma\vec{M} \times \vec{B}, \quad (3)$$

missä \vec{M} on magnetisaatio. Tämä yhtälö voidaan lausua komponenteittain muodossa

$$\begin{cases} \frac{d\vec{M}_x}{dt} = \gamma M_y B, \\ \frac{d\vec{M}_y}{dt} = -\gamma M_x B, \\ \frac{d\vec{M}_z}{dt} = 0. \end{cases} \quad (4)$$

Koska magnetisaatio pyörii kohtisuorassa ulkoista magneettikenttää ja z -akselia vastaan, ei magnetisaation z -komponentilla ole aikakehitystä. Magnetisaation vaakasuuntainen komponentti voidaan lausua x - ja y -komponentin avulla $\vec{M}_\perp = M_x \hat{e}_x + M_y \hat{e}_y$, joka kompleksiluvuksi $M_{xy}(t) = M_x(t) + iM_y(t)$ muutettuna yksinkertaistaa yhtälön ratkaisua. Tällöin differentiaaliyhtälön

$$\frac{dM_{xy}}{dt} = \frac{dM_x}{dt} + i\frac{dM_y}{dt} = \gamma M_y B - i\gamma M_x B = -i\gamma B(M_x + iM_y) = -i\gamma B M_{xy} \quad (5)$$

ratkaisuksi saadaan $M_{xy}(t) = M_{xy}(t=0)e^{-i\omega t}$. [17]

2.3 Relaksaatio

Aikaisemmin esitelty Blochin yhtälön yksinkertaistettu versio (3) pätee vain, kun oletetaan, että yksittäiset protonit eivät vuorovaikuta keskenään tai ympäristönsä kanssa. Pyöriivät ytimet kuitenkin aiheuttavat ympärilleen magneettikentän, ja näin ne vaikuttavat ympärillään olevien ytimien kokemaan magneettikenttään. Tämän lisäksi ytimien momentit pyrkivät ulkoisen magneettikentän suuntaisiksi, jolloin magnetisaatioita kääntävän pulssin päätyttyä magnetisaatiot pyrkivät takaisin z -akselin suuntaisiksi. Tätä magnetisaation palautumista kutsutaan relaksaatioksi. [16] Relaksaatio voi olla toivottu ilmiö, kuten esimerkiksi eri kudostumusten relaksaatioaikojen avulla tehtävässä magneettikuvantamisessa.

Magnetisaation pituussuuntaisen komponentin relaksaatiosta johtuva muutos $dM_\parallel(t)/dt$ on suoraan verrannollinen tasapainomagnetisaation ja z -suuntaisen magnetisaation erotukseen $M_0 - M_\parallel$ sekä kääntäen verrannollinen kudokselle ominaiseen spinin pituussuuntaiseen relaksaatioaikaan T_1 : [16]

$$\frac{dM_\parallel}{dt} = \frac{1}{T_1}(M_0 - M_\parallel). \quad (6)$$

Ydinten lämpöliikkeestä johtuvan relaksaation relaksaatioaika T_1 kuvaa siis sitä, kuinka kauan kestää, että magnetisaation z -suuntainen komponentti palaa alkuarvoonsa. Ydinten magneettisesta vuorovaikutuksesta johtuvan relaksaation relaksaatioaika T_2 puolestaan kuvaa sitä, kuinka kauan poikittaissuuntaisen magnetisaation M_\perp häviäminen kestää. Poikittaissuuntaisen magnetisaation aikakehitystä kuvataan kaavasta (3) muokatulla differentiaaliyhtälöllä

$$\frac{d\vec{M}_\perp}{dt} = \gamma \vec{M}_\perp \times \vec{B} - \frac{1}{T_2} \vec{M}_\perp. \quad (7)$$

Yhtälö (7) voidaan erotella vielä x - ja y -suuntaisiin komponentteihin. y -akselin suuntainen muutos $\frac{dM_y}{dt}$ koostuu y -suuntaisesta relaksaatiosta $-\frac{M_y}{T_2}$ sekä magnetisaation negatiivisuuntaisesta pyörimisestä aiheutuvasta termistä $-w_0 M_x$. x -suuntainen muutos koostuu vastaavista termeistä. Magnetisaation x - ja y -suuntaiset muutokset ovat [16]

$$\frac{dM_x}{dt} = w_0 M_y - \frac{M_x}{T_2}, \quad (8)$$

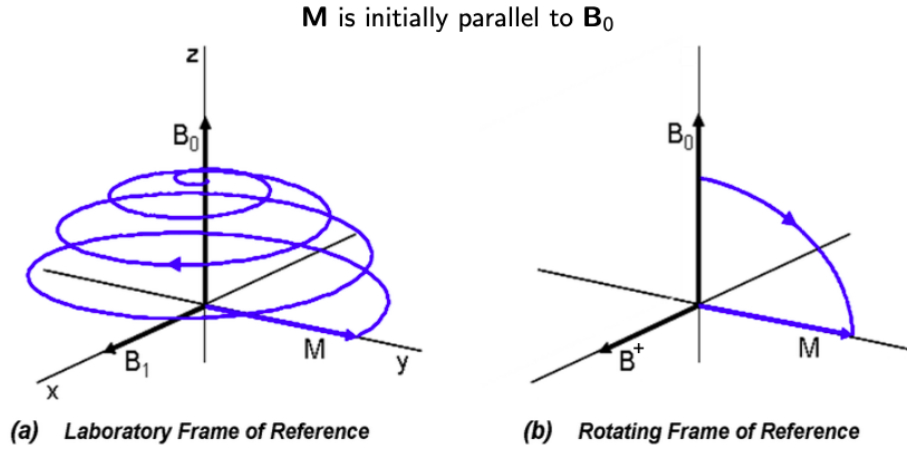
$$\frac{dM_y}{dt} = -w_0 M_x - \frac{M_y}{T_2}. \quad (9)$$

Kun yhtälöt (6) ja (7) kerätään yhteen, voidaan Blochin yhtälö (3) lausua relaksaatiot huomioon ottaen muodossa [16; 17]

$$\frac{d\vec{M}}{dt} = \gamma \vec{M} \times \vec{B} + \frac{M_0 - M_z}{T_1} \hat{e}_z - \frac{\vec{M}_\perp}{T_2}. \quad (10)$$

Yhtälön (10) ratkaisu saadaan helposti etsimällä ratkaisut yhtälöille (6) ja (7), kun $\vec{B} = \vec{B}_0$ ja alkuarvot hetkellä $t = 0$ ovat $M_\parallel(0)$ ja $M_\perp(0)$ ja M_∞ on magnetisaatio tasapainotilassa [16; 17]:

$$\begin{cases} M_\perp(t) = M_\perp(0)e^{-t/T_2}, \\ M_\parallel(t) = M_\parallel(0)e^{-t/T_1} + M_\infty(1 - e^{-t/T_1}). \end{cases} \quad (11)$$



Kuva 2: Magnetisaatio (A) staattisessa koordinaatistossa ja (B) pyörivässä koordinaatistossa [18].

2.4 Spinien kääntäminen pulsseilla

Ensimmäistä prekession aiheuttavaa magneettista pulssia kutsutaan usein virityspulssiksi tai 90 astetta magnetisaatioita kääntäväksi pulssiksi. Koordinaatiston z -akseli on asetettu magnetisaatiovektorin suuntaan, ja 90 astetta kääntävän pulssin jälkeen magnetisaatio on joko x - tai y -akselin suuntainen.

Pulssin jälkeen magnetisaatiovektori kiertää z -akselia xy -tasossa. Koska pyörivää vektoria on vaikea havainnollistaa, asetetaan magnetisaatiovektori pyörivään koordinaatistoon. Pyörivässä koordinaatistossa $x'y'$ -taso pyörii z -akselin ympäri tietyllä taajuudella, joka tässä tapauksessa asetetaan Larmorin taajuudeksi (1) vastaamaan prekessiotajuutta. Tällöin 90 astetta kääntävän pulssin jälkeen magnetisaatio on halutusti x - tai y -akselilla. Magnetisaation kääntämisestä 90 astetta pyörivässä koordinaatistossa on havainnollistus kuvassa 2 [18].

Kolmiulotteisen informaation saamiseksi homogeenisen \vec{B}_0 kentän lisäksi käytetään gradienttikenttiä. Gradienttikenttä tarkoittaa magneettikenttää, joka on heterogeeninen eli sen suuruus avaruuden eri pisteissä ei ole vakio. Gradienttikentän avulla eri avaruuden pisteisiin saadaan erivahvuinen, ja mahdollisesti erisuuntainen magneettikenttä. Tällöin myös prekessiotajuudet vaihtelevat avaruudessa, mikä mahdollistaa lopulta kolmiulotteisen kuvan muodostamisen.

Kun lähtötilanteessa magnetisaatiot ovat z -akselin suuntaiset ja niitä käännetään 90 astetta sopivan vektorin ympäri, asettuvat magnetisaatiot saman tason lisäksi samaan vaiheeseen. Kentän ei-toivotuista epähomogeenisuuksista aiheutuvien taajuuserojen takia avaruuden eri pisteissä sijaitsevat magnetisaatiovektorit saattavat pyöriä z -akselin ympäri hiukan eri taajuuksilla, jolloin ne päätyvät eri vaiheisiin pian 90 asteen käännyksen jälkeen. Tätä ilmiötä kutsutaan spinin poikittaiseksi relaxsaatioksi, jota voidaan mitata ajassa T_2 . Tämä merkintä kuvaa aikaa, joka spineillä kuluu päätyä samasta vaiheesta eri vaiheisiin. Ilmiöstä johtuen magnetisaatioihin syntyy taajuuseroja, eikä signaalia heti 90 astetta magnetisaatioita kääntävän pulssin

jälkeen monestikaan käytetä kuvan rakentamiseen [19]. Tätä varten on käytössä magnetisaatioita 180 astetta kääntävä pulssi, joka kääntää magnetisaatiot joko x' -tai y' -akselin ympäri.

Aiemmin esitelty poikittaissuuntaisen magnetisaation relaksaatioaika T_2 voidaan jakaa kahdenlaiseen ilmiöön. Ydinten välille syntyy vaihe-eroja ulkoisen kentän epähomogeenisuuksista, mitä kuvataan merkinnällä T_{2_1} , sekä yksittäisten ydinten muodostamien magneettikenttien vuorovaikutuksista, merkintä T_{2_2} . Tällöin T_2 voidaan esittää muodossa [16]

$$\frac{1}{T_2} = \frac{1}{T_{2_1}} + \frac{1}{T_{2_2}}. \quad (12)$$

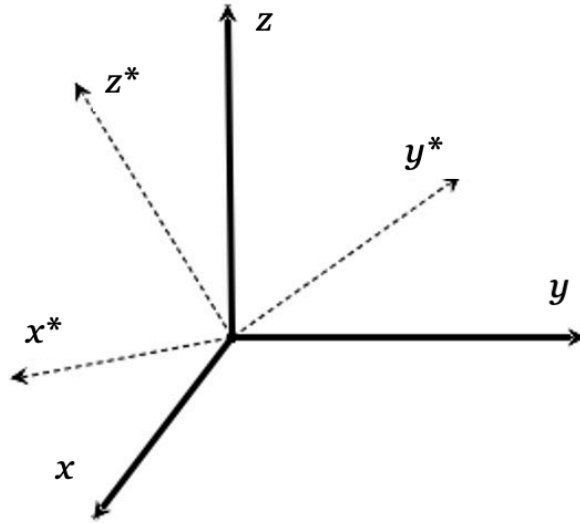
Yksittäisten ydinten välisistä magneettisista vuorovaikutuksista aiheutuva relaksaatio on satunnaista ja aikariippuvaa ja siksi mahdotonta korjata ulkoisilla magneettikentillä. Ulkoisen kentän epähomogeenisuuksista johtuvat relaksaatiot taas voidaan palauttaa 180 astetta magnetisaatioita kääntävän pulssin avulla [16; 17]. Tällöin magnetisaatio on edelleen $x'y'$ -tasossa, mutta käännöksen takia taajuuserot kumoutuvat ja syntyy niin kutsuttu kaiku. Tässä kaiussa esiintyy signaalin maksimi, josta lopullinen kuva koostetaan. Näitä 180 asteen käännöksiä voidaan tehdä useampia signaalin vahvistamiseksi ja datan keräämiseksi.

Tässä työssä T_2 riippuva relaksaatio jätetään huomioimatta. Tämä johtuu ensisijaisesti siitä, että työssä tarkasteltava ajanjakso on huomattavasti pienempi kuin T_2 , jolloin relaksaatiota ei ehdi tapahtua merkittävästi. Tämän lisäksi relaksaatioajoille pätee [17]

$$T_{2_1} < T_{2_2}, \quad (13)$$

eli kentän epähomogeenisuuksista johtuva relaksaatio tapahtuu nopeammin kuin ytimien aiheuttamista magneettikentän muutoksista aiheutuva relaksaatio. Ulkoisen kentän epähomogeenisuuksista aiheutuva relaksaatio on kuitenkin korjattavissa 180 astetta magnetisaatioita kääntävällä pulssilla. Työssä tarkasteltavan ajanjakson lyhyiden lisäksi epätarkkuuksien korjattavuuden ja yhtälön (13) takia T_2 -riippuva relaksaatio jätetään tässä työssä Blochin yhtälöstä (3) kokonaan ulos tarkastelusta.

Tämän lisäksi $T_2 < T_1$, [16; 17]. Koska kaiun tuottamisen jälkeen T_2 riippuvan relaksaation vaikutukset on todettu mitättömiksi, voidaan myös T_1 jättää tarkastelun ulkopuolelle. Tällöin yhtälön (10) sijaan voidaan käsitellä yksinkertaistettua Blochin yhtälöä (3), mikä yksinkertaistaa magnetisaation käsittelyä ja tulevaa matemaattista tarkastelua huomattavasti silti hyvän laskutarkkuuden säilyttäen.



Kuva 3: Esimerkki laboratoriokoordinaatiston akseleista x , y ja z sekä taipuvasta koordinaatistosta. Taipuvan koordinaatiston akselit ovat x^* -, y^* - ja z^* -akselit.

2.5 Magnetisaatio taipuvassa koordinaatistossa

Tässä työssä käsiteltävässä pulssimuotokytkennässä käytettävän gradienttikentän voimakkuuden lisäksi myös gradienttikentän suunta on paikasta riippuvaa. Tästä johtuen prekession aikakehitys on kolmiulotteista. Käytännön toteutuksen helpottamiseksi ja teoreettisen tarkastelun yksinkertaistukseksi esitellään taipuva koordinaatisto (bending frame of reference) [6]. Taipuva koordinaatisto tarkoittaa koordinaatistoa, jossa akselit kääntyvät suhteessa laboratoriokoordinaatistoon. Taipuvasta koordinaatistosta on havainnollistus kuvassa 3, jossa laboratoriokoordinaatiston akselit on nimetty x -, y - ja z -akseleiksi ja taipuvan koordinaatiston akselit x^* -, y^* - ja z^* -akseleiksi.

Helpomman matemaattisen käsittelyn takia käytetyn koordinaatiston z^* -akseli asetetaan ulkoisen magneettikentän suuntaiseksi. Tästä johtuen laboratoriokoordinaatisto asetetaan alussa staattisen \vec{B}_0 kentän suuntaiseksi. Kun gradienttikentät laitetaan päälle, paikasta riippuen ulkoisen magneettikentän suunta ei ole enää sama. Taipuvaa koordinaatistoa käytetään paikan suhteen heterogeenisen gradienttikentän takia, jolloin jokaiseen avaruuden pisteeseen asetetaan oma taipuva koordinaatisto. Jokaisen yksittäisen taipuvan koordinaatiston z^* -akseli on sen kokonaiskentän suuntainen.

Kun gradienttikenttä laitetaan päälle, gradienttikentän voimakkuus kasvaa, kunnes se saavuttaa toivotun vahvuuden. Kentän voimistumisen aikana taipuvan koordinaatiston kääntyminen suhteessa laboratoriokoordinaatistoon jatkuu, kunnes gradienttikenttä muuttuu staattiseksi. Kentän voimistumisvaiheen jälkeen taipuvat koordinaatistot eivät enää muutu, ellei gradienttikenttiä muuteta.

Staattisen \vec{B}_0 -kentän ja gradienttikentän $\Delta\vec{B}$ yhdistelmäkenttä on

$$\vec{B}(r, t) = \vec{B}_0 + \Delta\vec{B}(\vec{r}, t). \quad (14)$$

Koska gradienttikenttä $\Delta \vec{B}$ vahvistuu ajan myötä, muuttuu magneettikentän \vec{B} suunta ajassa gradienttikentän vahvistumisen ajan. z^* -akseli pidetään \vec{B} :n suuntaisena koko gradienttikentän vahvistumisen ajan, suorassa kulmassa koordinaatiston kääntymiskulmanopeuteen \vec{w} nähden. Jotta z^* -akseli pysyy \vec{B} :n suuntaisena koko magneettikentän muutoksen ajan, pitää vektorin \vec{w} pysyä kohtisuorassa myös magneettikentän muutosta $d\vec{B}$ vastaan. Vektorin \vec{w} suunta voidaan siis laskea ristitulosta

$$(\vec{B} + d\vec{B}) \times \vec{B}, \quad (15)$$

missä \vec{B} on magneettikenttä ja $\vec{B} + d\vec{B}$ magneettikenttä ajanmuutoksen dt jälkeen. Vektorin \vec{w} suuruus saadaan kaavasta

$$|\vec{B}||\vec{B} + d\vec{B}| \sin d\theta,$$

missä magneettikentän muutoskulma on [6]

$$d\theta = wdt. \quad (16)$$

Ajan infinitesimaaliselle muutokselle dt saadaan

$$|\vec{B}||\vec{B} + d\vec{B}| = B^2, \quad \sin d\theta = d\theta, \quad (17)$$

jolloin

$$|\vec{B}||\vec{B} + d\vec{B}| \sin d\theta = B^2 wdt, \quad (18)$$

kun käytetään yhtälöä (16). Nyt vektori \vec{w} voidaan esittää muodossa [6]

$$\vec{w}(t) = \frac{d\vec{B}(t)}{dt} \times \frac{\vec{B}(t)}{B(t)^2}. \quad (19)$$

2.6 Dynaaminen pulssimuotokytkenä (DynaCAN)

Magneettikuvaukseen on historian saatossa kehitetty useita eri tapoja luoda pulsseja, riippuen magneettikuvauksen tyypistä tai kohteesta. Tässä työssä käytetään hyväksi hyvin tuoretta menetelmää nimeltä DynaCAN eli dynaaminen pulssimuotokytkenä [5; 6]. DynaCAN-menetelmää voidaan soveltaa moneen eri tarkoitukseen, ja sillä on magneettikuvauksessakin useita eri käyttötarkoituksia. Menetelmää on käytetty esimerkiksi haitallisten pyörrevirtojen poistamiseen [5], mutta tässä työssä keskitytään menetelmän soveltamiseen spinejä kääntävää magneettista pulssia luodessa [6].

Suuri hyöty DynaCAN-menetelmässä on se, että menetelmän avulla voidaan luoda pulssi, joka kääntää magnetisaatioita nopeasti ottaen samalla huomioon taipuvan koordinaatiston. Lisäksi paikkatietoa spineihin koodaava gradienttikenttä voidaan pitää päällä koko pulssin ajan.

Dynaaminen pulssimuotokytkenä sopii erityisen hyvin tapauksiin jossa systeemin haluttu lopputilanne on tarkasti tiedossa. Tässä työssä magnetisaatioiden toivottu suunta riippuu tarkasti halutusta spinien käännöksestä, joten systeemin lopputila on tarkasti laskettavissa. Tämän lisäksi dynaamisessa pulssimuotokytkenässä aikaa käytetään hyväksi niin, että systeemi voi pulssin aikana olla mielivaltaisessa tilassa, kunhan lopputila vastaa haluttua tilannetta.

3 Menetelmät ja optimointitehtävän määrittely

Tämän työn tavoitteena on muodostaa kaksi magneettista pulssia, jotka kääntävät kohdealueen magnetisaatioita joko 90 tai 180 astetta, pulssista riippuen. Pulssit suunnitellaan Python-ohjelmointikielellä tuotetulla optimointikoodilla. Koodissa käytetään hyväksi Python-kielen NumPy- ja SciPy-paketteja [20; 21], sekä magnetisaation liikettä ja Blochin yhtälöä (3) simuloivaa Blochsimu-pakettia [7].

Optimointialgoritmina koodissa on käytetty SciPy-paketin Sequential Least Squares Programming (SLSQP) algoritmia [22]. SLSQP perustuu Sequential Quadratic Programming (SQP) optimointimethodiin, joka hakee ratkaisua epälineariselle optimointiongelmalle iteratiivisesti Newtonin menetelmän ja kvadraattisen ohjelmoinnin (Quadratic Programming, QP) avulla [23].

3.1 Magnetisaatioita 90 astetta kääntävän pulssin suunnittelu

Optimoinnin tavoitteena on tuottaa pulssi, jonka päätteeksi magnetisaatiot osoittavat haluttuun suuntaan. Tämä suunta saadaan simuloimalla koodin avulla magnetisaation liikettä ideaalitulanteessa. Ideaalitulanne määritellään niin, että ainoat magnetisaation vaikuttavat magneettikentät pulssin aikana ovat gradienttikenttä ja staattinen B_0 -kenttä. Tämän lisäksi magnetisaation virittymisen oletetaan tapahtuvan $t = 0$ hetkellä spontaanisti. Tällä oletuksella magnetisaation vaikuttavia relaksaatioprosesseja ei tarvitse huomioida. Näin virityspulssin suuntaamien magnetisaatioiden optimaalisiksi suunniksi saadaan edellä mainittujen ideaalitulanteen magnetisaatioiden suunnat pulssin loppuhetkellä $t = T/2$. Ideaalitulanteen pulssin loppuhetken magnetisaatioita kutsutaan vastaisuudessa ideaaleiksi magnetisaatioiksi, ja optimointialgoritmin käsittelemiä magnetisaatioita simuloituiksi magnetisaatioiksi.

Optimointialgoritmi pyrkii minimoimaan ideaalien magnetisaatioiden ja simuloitujen magnetisaatioiden välisten erotusvektorien pituudet. Sekä ideaalien magnetisaatioiden että simuloitujen magnetisaatioiden tapauksessa magnetisaatiot ovat 90 astetta magnetisaatioita kääntävän pulssin alussa hetkellä $t = -T/2$ ulkoisen magneettikentän suuntaisia. Magnetisaatiot ovat siis alussa gradienttikentän ja B_0 -kentän vaikutuksesta taipuvan koordinaatiston z^* -akselin suuntaisia. Optimoinnissa ja tulosten analyysissä magnetisaatioita käsitellään taipuvassa koordinaatistossa, jonka akselit ovat x^* , y^* ja z^* . Optimoinnin suorittaminen taipuvassa koordinaatistossa on laskennallisesti kevyempää ja nopeampaa, sillä koodin toistuvista osioista saadaan tiiviimpiä ja yksinkertaisempia.

Käytetyn gradienttikentän vaikutus avaruuden pisteissä kuvataan kaavalla [6]

$$[\Delta B_x \ \Delta B_y \ \Delta B_z]^\top = -\mu \mathbf{H} \mathbf{r}, \quad (20)$$

missä $[\Delta B_x \ \Delta B_y \ \Delta B_z]^\top$ ovat gradienttikentän $\Delta \vec{B} = \Delta B_x \hat{e}_x + \Delta B_y \hat{e}_y + \Delta B_z \hat{e}_z$ komponentit, μ on väliaineen permeabiliteetti, \mathbf{H} on gradienttikentän muodon mää-

rittelevä matriisi ja paikkavektori $\mathbf{r} = [x \ y \ z]^\top$. Tässä työssä

$$-\mu\mathbf{H} = \frac{BW\pi}{r\gamma} \begin{pmatrix} -0.5 & 0 & 0 \\ 0 & -0.5 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (21)$$

missä BW on käytetty kaistanleveys 1000 Hz, r on pallonmuotoisen tutkimusalueen säde 0,1 m ja γ jo aiemmin esitelty gyromagneettinen suhde.

Tässä työssä ideaaleja magnetisaatioita käännetään 90 astetta y^* -akselin ympäri negatiiviseen kiertosuuntaan, jolloin kääntymisen päätteeksi hetkellä $t = 0$ tavoitemagnetisaatiot ovat x^* -akselilla. Loppupulssin ajan magnetisaatiot kiertävät z^* -akselia x^*y^* -tasossa, ja pulssin lopussa niiden sijainti asetetaan optimointialgoritmin tavoitteeksi. Tosiasiassa magnetisaation reitti loppupisteeseensä on paljon mielivaltaisempi ja kiertyminen z^* -akselilta x^*y^* -tasoon tapahtuu vähitellen koko pulssin ajan.

Magnetisaatioiden erotusvektorien pituudet lasketaan jokaiselle samassa avaruuden pisteessä sijaitsevalla ideaalin ja simuloidun magnetisaation muodostamalle parille. Lopulliseen optimoitavaan funktioon otetaan näiden pituuksien keskiarvo. Avaruuden pisteessä j sijaitsevan simuloidun magnetisaation \vec{M}_s ja ideaalin magnetisaation \vec{M}_i välisen erotusvektorin neliöity pituus d_j on

$$d_j = \|\vec{M}_{s_j} - \vec{M}_{i_j}\|^2, \quad (22)$$

missä \vec{M}_{s_j} on simuloitu magnetisaatio ja \vec{M}_{i_j} on ideaali magnetisaatio avaruuden pisteessä j .

Koska optimointialgoritmi tuottaa pulssin ULF-MRI laitteeseen, on kohdefunktioon toteutettu pulssin amplitudia rajoittava osa, niin kutsuttu sakkotermi. Mikäli pulssin maksimiamplitudi ylittää vakioksi asetetun arvon, erotuksen suuruus korotetaan toiseen potenssiin ja kerrotaan suurella luvulla, tässä tapauksessa sadalla tuhannella. Mikäli pulssin maksimiamplitudi pysyy alle asetetun maksimin, sakkotermint arvoksi asetetaan nolla, jolloin amplitudia rajoittava termi häviää kohdefunktiosta. Näin maksimiamplitudin ylittäminen tehdään miltei mahdottomaksi optimointialgoritmile.

Optimointialgoritmi toimii numeerisesti paremmin hieman suuremmilla luvuilla, minkä takia erotusvektorien pituuksien neliöiden keskiarvo on kerrottu sadalla. Tällöin minimoitava kohdefunktio on muotoa

$$f_{90} = 100 \frac{\sum_{j=1}^k d_j}{k} + 100000a_{90}^2, \quad (23)$$

missä d_j on yhtälön (22) avulla laskettu erotusvektorin pituus avaruuden pisteessä j , k on magnetisaatioparien ja samalla erotusvektorien lukumäärä ja a_{90} on edellä mainittu sakkotermi.

Kohdefunktio (23) tukikoodeineen syötetään optimointialgoritmile optimoinnin kohteeksi. Algoritmi muuttaa aaltomuodon kantafunktioiden kertoimia niin, että kohdefunktion arvo lähestyy minimiä. Alkuarvaukseksi algoritmile annetaan nollavektori, jonka komponenttien lukumäärä on sama kuin aaltomuodon kantafunktioiden lukumäärä.

Aaltomuoto luodaan sinifunktioiden painotettuna summana. Käytetyt sinifunktiot ovat muotoa

$$\sin\left(\frac{x + T/2}{T}l\pi\right), \quad (24)$$

missä $-T/2$ on pulssin alkuhetki, T on pulssin kesto ja $l = 1, \dots, n$ on kyseisen aaltomuodon järjestysnumero, kun n on valittu kantafunktioiden lukumäärä. Sinifunktiot kerrotaan ikkunafunktiolla, jonka avulla pulssin amplitudi pakotetaan pulssin alussa ja lopussa nolaksi. Tämän lisäksi ikkunafunktiolla varmistetaan, että pulssin alkuun ja loppuun ei synny terävää kulmaa.

Algoritmi muuttaa aaltomuodon kantojen kertoimia iteratiivisesti lähestyen minimiä. Minimointialgoritmiksi valikoitui Python-ohjelmointikieltä käyttävän SciPy-paketin Optimize-osion SLSQP-menetelmä eri menetelmien empiirisen vertailun päätteeksi. SLSQP sopii monen muuttujan skalaarifunktion optimointiin eri rajoilla. Funktion pitää kuitenkin olla kahdesti jatkuvasti derivoituva, mitä kaavan (23) mukainen funktio on.

3.2 Magnetisaatioita 180 astetta kääntävän pulssin suunnittelu

Magnetisaatiota 180 astetta kääntävä pulssi toimii samalla periaatteella kuin 90 astetta kääntävä pulssi, mutta sama prosessi toteutetaan useampaan suuntaan osoittaville alkumagnetisaatioille. Pulssia optimoitaessa magnetisaation kääntymistä pulssin keskikohdassa tarkastellaan kolmeen eri suuntaan; x^* -akselilta $-x^*$ -akselille, y^* -akselilta y^* -akselille ja z^* -akselilta $-z^*$ -akselille, eli jokaista taipuvan koordinaatiston kantavektorin suuntaista magnetisaatiota käännetään 180 astetta y^* -akselin ympäri. Näin siis magnetisaatiovektorit pulssin keskikohdassa hetkellä $t = 0$ ovat tiedossa ja magnetisaatiovektorien esitykset ennen pulssin alkua saadaan selville simuloimalla magnetisaatioita taaksepäin ajassa puolen pulssin $T/2$ ajan. Nämä kolme eri alkeistapausta pyritään virittämään mahdollisimman tarkasti saman magneettisen virituspulssin avulla.

Magnetisaatioita 90 astetta kääntävän pulssin optimointialgoritmin mukaisesti myös 180 astetta magnetisaatioita kääntävä pulssi käyttää muuttujinaan aaltomuodon kantafunktioiden kertoimia. Samoin myös kohdefunktio koostuu ideaalien ja simuloitujen magnetisaatioiden muodostamien parien erotusvektorien pituuksien neliöiden keskiarvoista. Erotusvektorien neliöt on ryhmitelty kolmeen eri ryhmään riippuen siitä, mihin alkeistapaukseen vektorit kuuluvat. Näin niiden keskiarvoille voidaan antaa kohdefunktiossa kertoimet, joiden avulla tiettyjen suuntien optimointia voidaan suosia toisen suunnan kustannuksella, tai pulssia voidaan kehittää suuntaamaan vektorit mahdollisimman tarkasti tiettyyn suuntaan. Tämän lisäksi myös 180 astetta magnetisaatioita kääntävän pulssin amplitudi rajoitetaan manuaalisesti asetettavaan arvoon, ja kohdefunktioon lisätään sama amplitudia rajoittava termi kuin magnetisaatioita 90 kääntävän pulssin kohdefunktiossa. Optimointialgoritmi minimoi siis funktion

$$f_{180} = 1000 \frac{\sum_{j=1}^u d_{x_j}}{u} + 1000 \frac{\sum_{j=1}^u d_{y_j}}{u} + 50 \frac{\sum_{j=1}^u d_{z_j}}{u} + 100000 a_{180}^2 \quad (25)$$

arvon. Erotusvektorien pituuksien neliöt ryhmitettynä virittymisen hetkellä x^* -, y^* - ja z^* -akselien suuntaisiin ryhmiin ovat vastaavasti d_x , d_y ja d_z . Kuten myös 90 astetta magnetisaatioita kääntävän pulssin tapauksessa j kuvaa yksittäistä tarkasteltavaa paikkapistettä, u on käsiteltävien magnetisaatioparien ja samalla erotusvektorien lukumäärä ja a_{180} on amplitudin rajoituksen vuoksi lisätty sakkotermi. Jos erotus on negatiivinen, on muuttujan a_{180} arvo nolla.

Virittymisen tarkesteleminen kolmessa eri ortogonaalisessa suunnassa riittää tuottamaan pulssin, joka virittää minkä tahansa muun vektorin haluttuun suuntaan, sillä kaikki avaruuden vektorit voidaan lausua näiden kolmen tapauksen lineaarikombinaationa. Koska 180 astetta kääntävää pulssia ennen toteutetaan joko magnetisaatiot x^*y^* -tasoon virittävä pulssi tai x^*y^* -tasosta x^*y^* -tasoon kääntävä 180 asteen pulssi, on kaavassa (25) termien d_x ja d_y minimoituminen tärkeämpää kuin termin d_z . Optimointialgoritmi pakotetaan priorisoimaan termejä d_x ja d_y antamalla niille summaan suuremmat kertoimet kuin termille d_z . Amplitudia rajoittavan termin kerroin on asetettu eri kertoimia vertailemalla niin, että optimointialgoritmi ei pysty päätymään ratkaisuun, jossa a_{180} olisi merkittävästi positiivinen.

4 Tulokset

Tässä osiossa tarkastellaan tuotettuja magneettisia virityspulseja analysoimalla niiden tarkkuutta virittää magnetisaatioita teoreettiseen optimiin. Pulssi on sama kaikkialla avaruudessa. Virityspulssin absoluuttisen maksimiampplitudin tähdätään olevan mahdollisimman pieni, mutta maksimissaan 30 mikrotteslaa. Lisäksi pulssin keston toivotaan olevan mahdollisimman lyhyt, noin kolme millisekuntia mutta maksimissaan viisi millisekuntia.

Mahdollisimman hyvien pohjatulosten löytämiseksi sekä 90 että 180 asteen virityspulssien kestoiksi asetettiin viisi millisekuntia, ja pulssien maksimiampplitudi rajoitettiin sataan mikrotteslaan. B_0 -kenttä asetettiin molemmissa tapauksissa z -akselin suuntaiseksi ja 50 mikrotteslan voimakkuiseksi. Gradienttikentän voimistumisen asetettiin kestävän yhden millisekunnin, ja sekä 90 että 180 astetta magnetisaatioita kääntävien pulssien voimistumisen kestoksi asetettiin puoli millisekuntia.

Pulseja tarkastellaan amplitudin ja pulssin keston lisäksi myös aika- ja paikkapisteiden lukumäärän suhteen. Aikapisteillä tarkoitetaan niitä hetkiä pulssin aikana, joissa toteutettu koodi käsittelee magnetisaatioita. Paikkapisteet kuvaavat avaruuden pisteitä, joissa magnetisaatioiden suuntaa tarkastellaan. Mitä enemmän aika- ja paikkapisteitä käytetään pulssin rakentamisessa ja tarkastelussa, sitä paremmin tulosten pitäisi vastata todellisuutta. Aika- ja paikkapisteiden lisääminen pidentää laskenta-aikaa ja tekee pulssin analysoimisesta raskaampaa ja näin vaikeampaa, minkä takia työssä esitellään myös aika- ja paikkapisteiltään yksinkertaisempia pulseja.

Molemmille tarkastelluille kääntökulmille valittiin kolme esimerkkipulssia, jotka kuvastavat optimointikoodin toimintaa monipuolisesti. Esimerkkipulsseiksi valittiin sellaiset pulssit, joilla koodin toimintaa voitiin tutkia aikapisteiden, paikkapisteiden ja aaltomuodon kantojen lukumäärää muuttellen.

4.1 90 astetta magnetisaatioita kääntävät pulssit

Taulukko 1: Magnetisaatioita 90 astetta kääntävät pulssit.

Pulssi	Aaltomuodon kantafunktioiden määrä	Paikkapisteiden määrä	Aikapisteiden määrä
90(A)	40	1	1000
90(B)	28	360	1000
90(C)	38	1088	100

Taulukko 2: Magnetisaatioiden käyttäytyminen eri pulsseissa.

Pulssi	$\max(B)$	$\text{mean}(a_x)$	$\max(a_x)$	$\text{mean}(a_z)$	$\max(a_z)$
90(A)	13,5861	0,0002	0,0002	0,0000	0,0000
90(B)	15,1206	0,1614	0,4081	0,0013	0,3748
90(C)	16,6705	0,1427	0,4410	0,0002	0,4115

Taulukossa 1 on esitetty valittujen esimerkkipulssien muuttujien arvot. Sarakkeessa *Pulssi* on esitetty nimi, jolla kyseiseen pulssiin viitataan myöhemmin tekstissä. Sarake *Aaltomuodon kantafunktioiden määrä* kuvaa sinifunktioiden määrää, joista pulssimuoto on koostettu. Sarakkeessa *Paikkapisteiden määrä* on esitetty optimointialgoritmin käsittelemien magnetisaatiovektorien määrä. Magnetisaatiovektorit sijaitsevat kolmiulotteisessa avaruudessa akselien suhteen tasaisin välimatkoin, ja ne on rajattu avaruudessa pallon muotoiselle alueelle niin, että pallon keskipiste sijaitsee laboratorikoordinaatiston origossa. *Aikapisteiden määrä* jakaa aika-akselin osiin, joissa algoritmi käsittelee magnetisaation sijaintia. Aikapisteiden lukumäärän yksikkö on pistettä millisekunnissa.

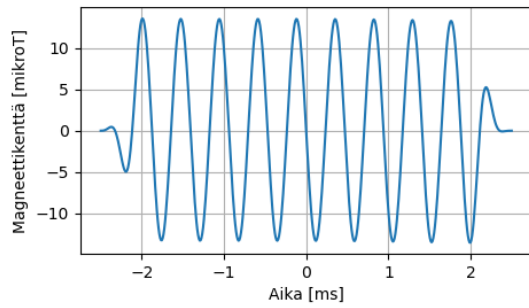
Magnetisaatioita 90 astetta kääntävistä pulsseista valittiin ne, joissa paikkapisteitä on yksi, 360 ja 1088 kappaletta. Aikapisteiden määrä pyrittiin pitämään mahdollisimman korkeana kuitenkin niin, että algoritmi löytää minimin. Aaltomuotojen kantojen määrää muutettiin iteratiivisesti minimin parantamiseksi.

Yksinkertaisimmassa tapauksessa, eli kun optimoitavia magnetisaatiovektoreita oli vain yksi, algoritmi löysi minimin. Magnetisaatiovektori on pulssin 90(A) tapauksessa siis tarkasti x^* -akselilla. Pulssimuoto on hyvin symmetrinen, ja maksimiamplitudi yhden paikkapisteiden tapauksessa on noin 13,59 mikrotteslaa.

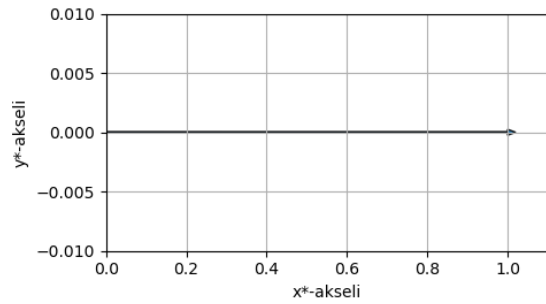
Kun paikkapisteiden määrä lisätään 360 pisteeseen, pulssin suurin absoluuttinen amplitudi on pulssin puolivälin $t = 0$ vaiheilla. Absoluuttinen maksimiamplitudi on 15,12 mikrotteslaa, mikä on selvästi alle asetetun sadan mikrotteslan rajan ja myös alle tavoitellun 30 mikrotteslan rajan.

Pulssissa 90(C) aikapisteiden määrää jouduttiin laskemaan tuhannesta sataan, jotta algoritmi löysi optimin. Pulssin absoluuttinen maksimiamplitudi on kuitenkin vain hieman korkeampi kuin pulssin 90(B) tapauksessa: 16,67 mikrotteslaa. Pulssin 90(C) pulssimuoto näyttää hyvin samankaltaiselta kuin pulssin 90(B) pulssimuoto, ja myös pulssissa 90(C) pulssin absoluuttinen maksimiamplitudi havaitaan heti pulssin keskikohdan $t = 0$ jälkeen.

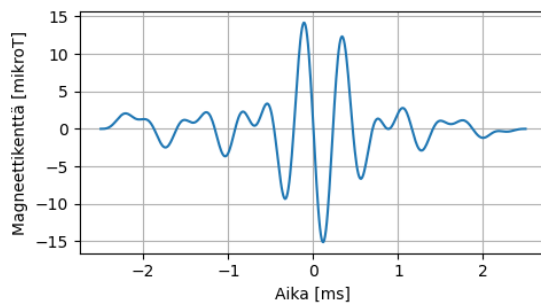
Esimerkkipulssina käytettyjen virityspulssien aaltomuotojen kantojen, paikkapisteiden ja aikapisteiden lukumäärät on esitetty taulukossa 1. Näitä muuttujien arvoja käyttämällä tuotettujen pulssien optimit on kuvattu taulukossa 2. Taulukon 2 sarakkeessa *Pulssi* viitataan taulukossa 1 esiteltyihin pulsseihin käyttäen samaa nimeämistapaa. Taulukon 2 sarake $\max(|B|)$ sisältää pulssien absoluuttiset maksimiamplitudit. Saman taulukon sarakkeet $\text{mean}(a_x)$ ja $\max(a_x)$ kuvaavat keskiarvokulmaa ja absoluuttista maksimikulmaa ideaalisten ja simuloitujen magnetisaatioiden välillä. Sarakkeet $\max(a_z)$ ja $\text{mean}(a_z)$ kuvaavat vastaavasti sitä, kuinka



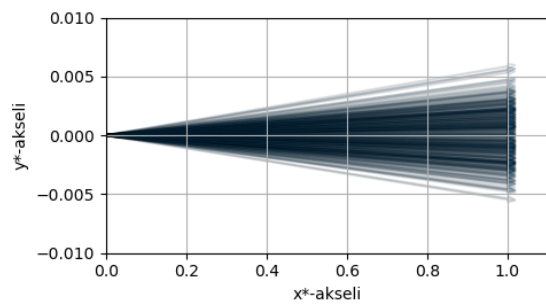
(a) Pulssi 90(A)



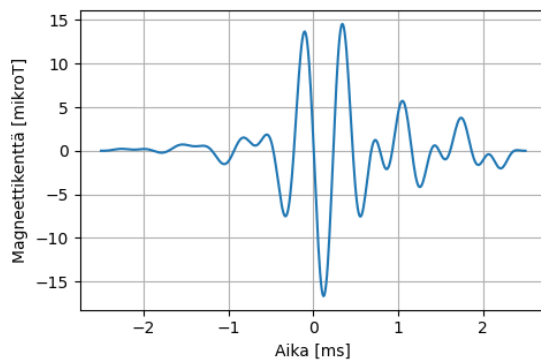
(b) Pulssi 90(A), magnetisaatio



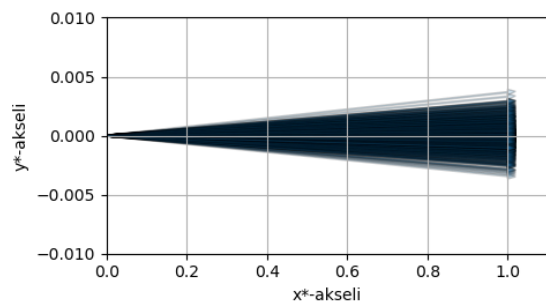
(c) Pulssi 90(B)



(d) Pulssi 90(B), magnetisaatiot



(e) Pulssi 90(C)



(f) Pulssi 90(C), magnetisaatiot

Kuva 4: 90 astetta magnetisaatioita kääntävien pulssien pulssimuodot ja magnetisaatiot.

paljon simuloitua magnetisaatioita poikkeavat x^*y^* -tasosta.

Kaikkien 90 astetta magnetisaatioita kääntävien pulssien kohdalla ideaalien magnetisaatioiden ja simuloitujen magnetisaatioiden väliset kulmat ovat huomattavasti alle yhden asteen. Yksinkertaisimmassa pulssissa 90(A), eli yhden paikkapisteen tapauksessa magnetisaatiot virittyvät lähes tarkalleen optimiin, ja ovat halutusti x^*y^* -tasossa. Pulsseissa 90(B) ja 90(C) magnetisaatiot virittyvät myös hyvin x^*y^* -tasoon saraketta $\text{mean}(a_z)$ tarkastellessa, mutta simuloitun magnetisaation ja x^*y^* -tason välinen absoluuttinen maksimikulma on merkittävästi suurempi kuin pulssin 90(A) tapauksessa.

Kuvassa 4 on esitetty 90 astetta magnetisaatioita kääntävien pulssien pulssimuodot ensimmäisessä sarakkeessa (kuvat 4ace) ja havainnollistavat kuvat magnetisaatioiden sijainnista pulssin lopuksi kuvan toisessa sarakkeessa (kuvat 4bdf). Pulssimuodoista huomataan, että paikkapisteen lukumäärän kasvaessa pulssin muoto muuttuu monimutkaisemmaksi. Samalla pulssilla joudutaan samalla kertaa virittämään useampaa magnetisaatiota, mikä vaatii monimutkaisempaa pulssia. Tämän lisäksi pulsseilla on eri määrä kantafunktioita ja eri kantafunktioiden kertoimet, mitkä selittävät pulssien eroavaisuutta.

Magnetisaatiovektoreita esittävistä kuvista (kuvat 4bdf) voidaan huomata, että magnetisaatiovektorit ovat hajaantuneet pulssien 90(B) ja 90(C) tapauksessa x^* -akselin molemmiin puolin. Magnetisaatiot ovat pääosin x^* -akselilla ja harvenevat kulman kasvaessa. Tarkiten magnetisaatio sijaitsee x^* -akselilla yhden paikkapisteen tapauksessa, kuvassa 4b.

4.2 90 astetta magnetisaatioita kääntävien pulssien tarkastelu

Taulukko 3: 90 astetta magnetisaatioita kääntävät pulssit, kun aikapisteen määrä on kaksinkertainen pulssin luonnissa käytettyyn aikapisteen määrään verrattuna

Pulssi	Aaltomuodon kantafunktioiden määrä	Paikkapisteen määrä	Aikapisteen määrä
90(A)	40	1	2000
90(B)	28	360	2000
90(C)	28	1088	200

Algoritmin suoriutumista tutkittiin työssä myös analysoimalla sitä, kuinka hyvin magnetisaatiot kääntyvät ideaalien magnetisaatioiden suuntaisiksi, kun aikapisteen määrä kaksinkertaistetaan. Tavoitteena on löytää pulssi, joka kääntää magnetisaatioita hyvin aikapisteen määrästä riippumatta, mutta varsinkin silloin, kun aikapistettä lisätään pulssin luonnissa käytetystä aikapisteen määrästä. Taulukossa 3 on esitetty pulssien muuttujien manuaalisesti asetetut arvot, kun aikapisteen on kaksinkertaistettu. Muut muuttujien arvot ovat samat kuin taulukossa 1.

Taulukko 4: Taulukko magnetisaatioiden käyttäytymisestä eri pulsseissa, kun aikapisteiden määrä on kaksinkertainen pulssin luonnissa käytettyyn aikapisteiden määrään verrattuna

Pulssi	$\max(B)$	$\text{mean}(a_x)$	$\max(a_x)$	$\text{mean}(a_z)$	$\max(a_z)$
90(A)	13,5861	0,0291	0,0291	0,0103	0,0103
90(B)	15,1203	0,1616	0,4091	0,0005	0,3732
90(C)	16,6707	0,1426	0,4422	0,0018	0,4129

Magnetisaatioiden virittyminen on esitelty taulukossa 4, jossa sarakkeiden nimet noudattavat taulukon 2 sarakkeita. Taulukkoja vertailemalla voidaan kuitenkin huomata, että absoluuttiset maksimiampplitudit eroavat hieman toisistaan.

Kaikkia pulsseja analysoitaessa simuloitujen ja ideaalisten magnetisaatioiden välinen ero pysyi alle yhdessä asteessa, vaikka aikapisteiden määrä oli kaksinkertaistettu. Keskiarvokulmia $\text{mean}(a_x)$ tarkastellessa pulssi 90(B) käänsi magnetisaatioita huonoiten kohti optimia, ja pulssi 90(A) parhaiten. Maksimikulmaa $\max(a_x)$ tarkastellessa pulssi 90(A) käänsi magnetisaatioita edelleen parhaiten, mutta epätarkimmin magnetisaatioita käänsi pulssi 90(C).

4.3 180 astetta magnetisaatioita kääntävät pulssit

Taulukko 5: Magnetisaatioita 180 astetta kääntävät pulssit.

Pulssi	Aaltomuodon kantafunktioiden määrä	Paikkapisteiden määrä	Aikapisteiden määrä
180(A)	32	1	1000
180(B)	32	8	1000
180(C)	34	56	100

Taulukko 6: Magnetisaatioiden käyttäytyminen eri pulsseissa.

Pulssi	$\max(B)$	$\text{mean}(a_x)$	$\max(a_x)$	$\text{mean}(a_y)$	$\max(a_y)$	$\text{mean}(a_z)$	$\max(a_z)$
180(A)	23,1882	0,0010	0,0010	0,0006	0,0006	0,0010	0,0010
180(B)	72,0194	0,0893	0,1036	0,0893	0,1036	0,0010	0,0014
180(C)	54,6460	0,1637	0,5274	0,1746	0,6464	0,5463	0,8532

Myös 180 astetta magnetisaatioita kääntävien pulssien tapauksessa esimerkkipulssija on kolme. Esimerkkipulssit manuaalisesti asetettuine muuttujien arvoineen

Taulukko 7: Magnetisaatioiden käyttäytyminen eri pulsseissa, x^*y^* -tasolle kuuluvien magnetisaatioiden deviaatio x^*y^* -tasosta.

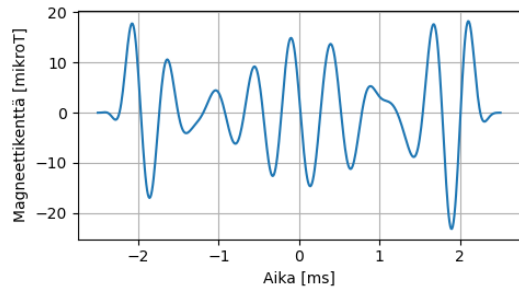
Pulssi	$\max(B)$	$\text{mean}(a_{xz})$	$\max(a_{xz})$	$\text{mean}(a_{yz})$	$\max(a_{yz})$
180(A)	23,1882	0,0010	0,0010	0,0006	0,0006
180(B)	72,0194	-0,0001	0,0012	-0,0001	0,0011
180(C)	54,6460	-0,0016	0,2980	-0,0064	0,5569

on esitetty taulukossa 5. Taulukon sarakkeet on nimetty samalla periaatteella kuin taulukossa 1. Kuten 90 astetta magnetisaatioita kääntävien pulssien tapauksessa, myös nyt paikkapisteiden lukumäärän varioimisen avulla pyritään tarkastelemaan algoritmin toimivuutta eri tilanteissa. Aikapisteiden määrä on pyritty pitämään mahdollisimman suurena ja aaltomuodon kantafunktioiden lukumäärä on määritetty kullekin pulssille parhaaksi mahdolliseksi empiirisen tarkastelun tuloksena. Koska magnetisaatioita 180 astetta kääntävän magneettisen pulssin tapauksessa pulssi kääntää magnetisaatioita kolmen eri ortogonaalisen lähtötapausten perusteella, on optimointi laskennallisesti huomattavasti raskaampaa kuin 90 astetta magnetisaatioita kääntävän pulssin tapauksessa, jossa lähtötapausta on vain yksi. Tästä johtuen hyvän minimin löytäminen osoittautui hankalaksi jo pienellä määrällä paikkapisteitä.

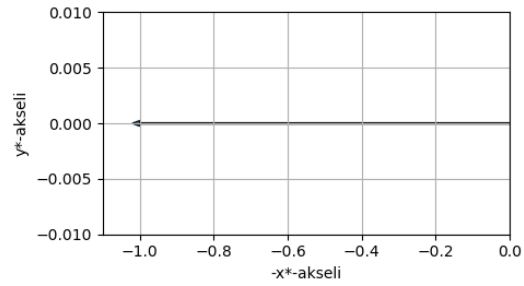
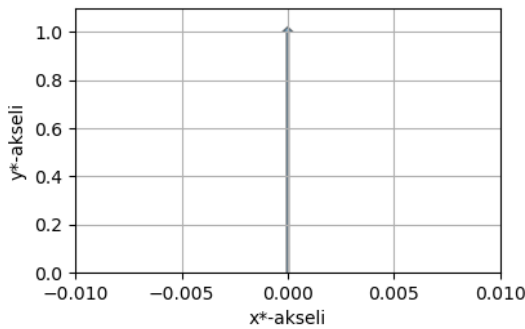
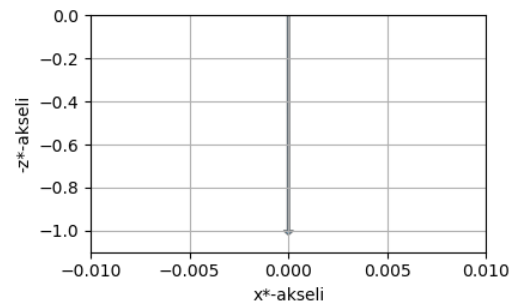
Algoritmin tuottamia optimeja on esitelty taulukoissa 6 ja 7. Sarakkeissa *Pulssi* on selkeyden vuoksi esitetty pulsseista käytetyt nimet taulukon 5 mukaisesti. Sarakkeet $\max(B)$ kuvaavat pulssien absoluuttisia maksimiamplitudeja. Taulukon 6 sarake $\text{mean}(a_x)$ on keskiarvo pulssin keskikohdassa x^* -akselilta $-x^*$ -akselille käännettyjen ideaalisten ja simuloitujen magnetisaatioiden välillä ja sarake $\max(a_x)$ vastaavasti näiden magnetisaatioiden välinen absoluuttinen maksimikulma. Samalla logiikalla sarakkeet $\text{mean}(a_y)$ ja $\max(a_y)$ kuvaavat y^* -akselilla pidettyjen ideaalien ja simuloitujen magnetisaatioiden keskiarvokulmaa ja absoluuttista maksimikulmaa. Edelleen taulukon 6 sarakkeet $\text{mean}(a_z)$ ja $\max(a_z)$ kuvaavat z^* -akselilta $-z^*$ -akselille käännettyjen ideaalisten ja simuloitujen magnetisaatioiden välistä keskiarvokulmaa ja absoluuttista maksimikulmaa.

Taulukossa 7 on kuvattu algoritmin tuottaman pulssin kykyä kääntää $-x^*$ - ja y^* -akseleille kuuluvat magnetisaatiot tarkasti x^*y^* -tasoon. Sarakkeet *Pulssi* ja $\max(|B|)$ ovat samat kuin taulukossa 6. Sarake $\text{mean}(a_{xz})$ kuvaa keskiarvokulmaa $-x^*$ -akselille viritettyjen magnetisaatioiden ja x^*y^* -tason välillä. Vastaavasti $\max(|a_{xz}|)$ kuvaa samaisten kulmien absoluuttista maksimia. Samoin $\text{mean}(a_{yz})$ ja $\max(|a_{yz}|)$ kuvaavat y^* -akselille viritettyjen magnetisaatioiden ja x^*y^* -tason välistä keskiarvokulmaa ja absoluuttista maksimikulmaa.

Kuvan 5 perusteella huomataan, että myös 180 astetta magnetisaatioita kääntävän pulssin tuottava optimointikoodi löytää minimin, jossa magnetisaatio viritetty tarkasti ideaaliin suuntaansa. y^* -akselille käännettävä magnetisaatio kääntyy tarkimmin ideaalisuunnista. Pulssin 180(A) absoluuttinen maksimiamplitudi on 23,19 mikrotteslaa, joka on alle tavoitellun 30 mikrotteslan rajan. Sen sijaan pulsseissa 180(B) absoluuttinen maksimiamplitudi ylittää 30 mikrotteslan rajan, mutta pysyy alle sa-



(a) Pulssin 180(A) pulssimuoto

(b) $-x^*$ -akselille viritetty magnetisaatio(c) y^* -akselille viritetty magnetisaatio(d) $-z^*$ -akselille viritetty magnetisaatio

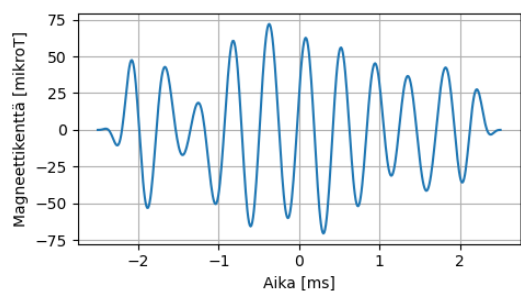
Kuva 5: Pulssin 180(A) pulssimuoto ja pulssin avulla käännetty magnetisaatio kolmessa eri ortogonaalisessa tapauksessa.

dan mikrotleslan. Kuvasta 6 voidaan havaita, kuinka pulssin 180(B) tapauksessa magnetisaatiot virittyvät $-x^*$ - ja y^* -akselien tapauksessa symmetrisesti ideaalin suunnan molemmiin puolin. Sen sijaan $-z^*$ -akselille viritetyt magnetisaatiot kääntyvät ideaaliin suuntaansa tarkasti.

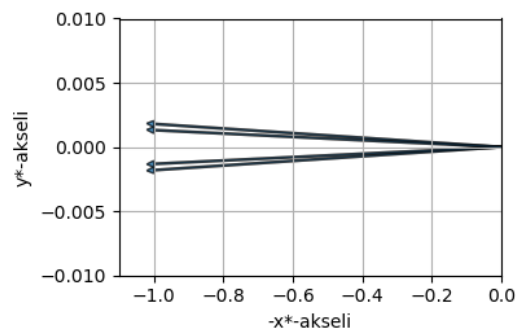
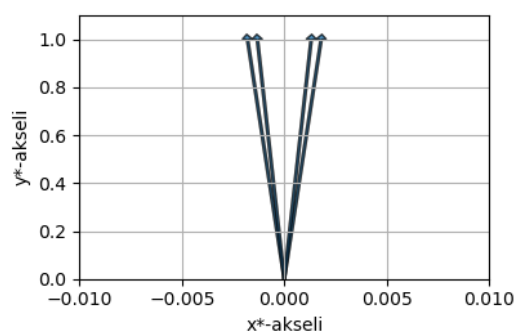
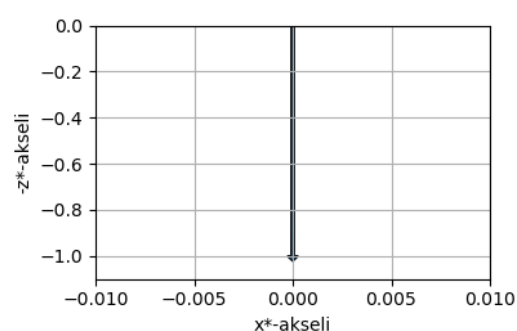
Taulukon 6 perusteella pulssi 180(C) kääntää magnetisaatioita epätarkimmin, mutta kuitenkin alle yhden asteen tarkkuuteen. Myös taulukkoa 7 tarkastelemalla pulssi 180(C) on muihin pulsseihin verrattuna kääntänyt magnetisaatiot epätarkemmin x^*y^* -tasoon.

4.4 180 astetta magnetisaatioita kääntävien pulssien tarkastelu

180 astetta magnetisaatioita kääntäviä pulsseja analysoitiin samalla tavalla kuin 90 astetta magnetisaatioita kääntäviä pulsseja, eli analysointiin pulssin kykyä kääntää magnetisaatioita optimiin kun algoritmin käyttämien aikapisteiden määrä kaksinkertaistettiin. Taulukossa 8 on esitetty pulssin muuttujien arvot kuten taulukossa 5, mutta pulssien aikapisteiden määrä on kaksinkertaistettu. Pulssin 180(C) tapauksessa on esitetty myös miten hyvin luotu pulssi kääntää magnetisaatioita kun aikapisteiden määrä kymmenkertaistetaan. Tällä pyrittiin kokeilemaan, pystyykö huomattavasti pienemällä määrällä aikapisteitä luomaan suurellakin aikapisteiden



(a) Pulssin 180(B) pulssimuoto

(b) $-x^*$ -akselille viritetyt magnetisaatiot(c) y^* -akselille viritetyt magnetisaatiot(d) $-z^*$ -akselille viritetyt magnetisaatiot

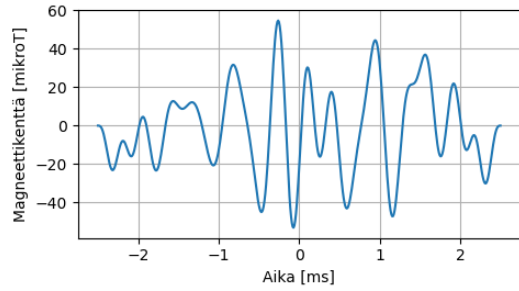
Kuva 6: Pulssin 180(B) pulssimuoto ja pulssin avulla käännetty magnetisaatiot kolmessa eri ortogonaalisessa tapauksessa.

Taulukko 8: 180 astetta magnetisaatioita kääntävät virityspulssit, kun aikapisteiden määrä on kaksinkertainen pulssin luonnissa käytettyyn aikapisteiden määrään verrattuna.

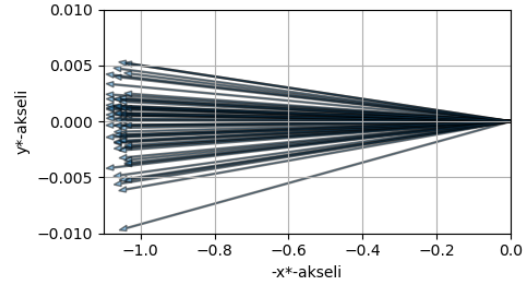
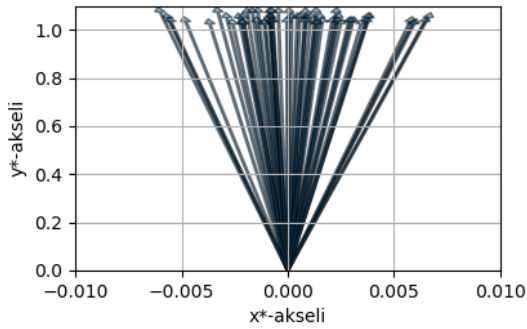
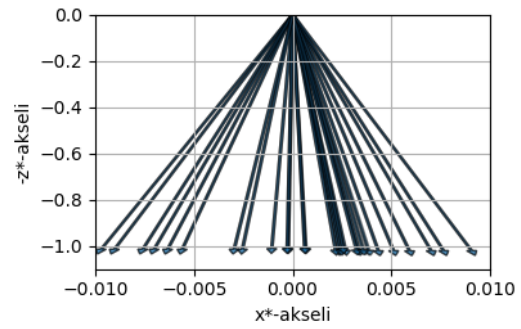
Pulssi	Aaltomuodon kantafunktioiden määrä	Paikkapisteiden määrä	Aikapisteiden määrä
180(A)	32	1	2000
180(B)	32	8	2000
180(C)	34	56	200
180(C)	34	56	1000

määrällä toimiva pulssi.

Taulukot 9 ja 10 esittävät simuloitujen magnetisaatioiden eroa ideaaleista magnetisaatioista samoilla attribuuteilla kuin taulukot 6 ja 7, vastaavassa järjestyksessä. Kuten taulukkoja 6 ja 9 vertailemalla huomataan, pulssin 180(A) tapauksessa magnetisaatiot kääntyvät huomattavasti epätarkemmin aikapisteitä lisättäessä kuin pulssia



(a) Pulssin 180(C) pulssimuoto

(b) $-x^*$ -akselille viritetyt magnetisaatiot(c) y^* -akselille viritetyt magnetisaatiot(d) $-z^*$ -akselille viritetyt magnetisaatiot

Kuva 7: Pulssin 180(C) pulssimuoto ja pulssin avulla käännetty magnetisaatiot kolmessa eri ortogonaalisessa tapauksessa.

Taulukko 9: Taulukko magnetisaatioiden käyttäytymisestä eri pulsseissa, kun aikapisteen määrä on kaksinkertainen pulssin luonnissa käytettyyn aikapisteen määrään verrattuna.

Pulssi	$\max(B)$	$\text{mean}(a_x)$	$\max(a_x)$	$\text{mean}(a_y)$	$\max(a_y)$	$\text{mean}(a_z)$	$\max(a_z)$
180(A)	23,1885	0,0156	0,0156	0,0303	0,0303	0,0291	0,0291
180(B)	72,0204	0,1030	0,1203	0,0904	0,1206	0,0434	0,0696
180(C)	54,7320	0,4397	0,9803	0,4876	1,1312	0,5496	1,2317
180(C)	54,7417	0,5528	1,1915	0,6185	1,3003	0,6297	1,4521

luodessa käytetyillä arvoilla. Simuloitujen ja ideaalisten magnetisaatioiden välinen kulma noin kymmenkertaistui, vaikka virhe pysyikin alle asteen kymmenesosassa, eli magnetisaatio kääntyi vielä erittäin tarkasti. Sen sijaan pulssin 180(B) tapauksessa keskiarvo- ja maksimikulmat ovat suunnilleen yhtä suuret alkuperäisellä ja kaksinkertaistetulla määrällä aikapistettä, lukuunottamatta $-z^*$ -akselille viritettyjä magnetisaatioita. $-z^*$ -akselille viritettyjen magnetisaatioiden ero ideaalista suunnasta yli kymmenkertaistui. Tämänkin pulssin kohdalla kaikkiin kolmeen ortogonaaliseen suuntaan käännettyjen simuloitujen ja ideaalien magnetisaatioiden välinen kulma

Taulukko 10: Magnetisaatioiden käyttäytyminen eri pulsseissa aikapisteiden määrä kaksinkertaistettuna, kun aikapisteiden määrä on kaksinkertainen pulssin luonnissa käytettyyn aikapisteiden määrään verrattuna. x^*y^* -tasolle kuuluvien magnetisaatioiden deviaatio x^*y^* -tasosta

Pulssi	$\max(B)$	$\text{mean}(a_{xz})$	$\max(a_{xz})$	$\text{mean}(a_{yz})$	$\max(a_{yz})$
180(A)	23,1885	-0,0092	0,0092	0,0276	0,0276
180(B)	72,0204	0,0290	0,0680	-0,0137	0,0163
180(C)	54,7320	-0,2372	0,7261	0,0948	1,0933
180(C)	54,7417	-0,3100	0,8996	0,1313	1,2681

pysyi reilusti alle yhdessä asteessa.

Myös pulssin 180(C) kohdalla virhekulma moninkertaistui, ja kun aikapisteitä on tuhat, virhekulman maksimi ylittää yhden asteen kaikissa kolmessa ortogonaalisessa tapauksessa. Kun aikapisteiden määrä vain kaksinkertaistetaan, pysyy ainoastaan $-x^*$ -akselille käännettyjen magnetisaatioiden virhe alle yhdessä asteessa. Maksimiampplitudeissa havaittu ero johtuu siitä, että aikapisteiden määrää vaihdettaessa mittauskohdat ovat hiukan eri kohdassa pulssia, jolloin maksimi saattaa hiukan erota aiemmasta.

Taulukkoa 10 tarkastelemalla huomataan, että $-x^*$ - ja y^* -akseleille käännetty magnetisaatiot päätyvät tarkasti x^*y^* -tasoon pulsseissa 180(A) ja 180(B), vaikka pulsseja kokeillaan aikapisteiden määrä kaksinkertaistettuna. Pulssin 180(C) tapauksessa huolimatta siitä, kasvatetaanko aikapisteiden määrää kaksin- vai kymmenkertaiseksi, y^* -akselille käännetty magnetisaatiot eivät pysy alle yhdessä asteessa x^*y^* -tasosta.

Taulukon 7 perusteella pulssin 180(B) x^*y^* -tasoon virittämät magnetisaatiot olivat parhaimmin ideaalissa suunnassa. Kun aikapisteiden määrä moninkertaistetaan, $-x^*$ -akselille käännettyjen magnetisaatioiden tapauksessa pulssi 180(A) kääntää magnetisaatioita tarkimmin x^*y^* -tasoon. y^* -akselin tapauksessa taas pulssi 180(B) on tarkin. Verrattuna pulsseihin 180(A) ja 180(B), pulssi 180(C) kääntää magnetisaatioita epätarkimmin x^*y^* -tasoon sekä kaksin- että kymmenkertaiset määrällä aikapisteitä. Kuitenkin pulssin 180(C) kohdalla aikapisteiden määrällä ei ole suurta merkitystä siihen, kuinka tarkasti halutut magnetisaatiot pysyvät x^*y^* -tasolla. Ero virhekulmassa kaksin- ja kymmenkertaiset määrällä on vain joitakin asteen kymmenyksiä.

5 Pohdinnat

Työssä optimoitiin 90 ja 180 astetta magnetisaatioita kääntävät magneettiset pulssit. Optimoitavat pulssit tuotettiin DynaCAN-tekniikalla, jolloin kokonaiskentän suunnan vaihtelu pystyttiin huomioimaan ja gradienttikenttä voitiin pitää päällä koko pulssimuotokytken ajan. Optimointi toteutettiin työn osana tuotettuna Python-koodina. Työhön tehdyssä koodissa apuna käytettiin optimointiin ja magnetisaation simuloimiseen tarkoitettuja paketteja nimeltä NumPy [21], SciPy [20] ja Blochsimu [7]. Itse optimointiongelma on minimointiongelma, jossa minimoitiin teoreettisen mallin pohjalta luotujen ideaalisten magnetisaatioiden ja algoritmin tuottaman pulssin avulla simuloitujen magnetisaatioiden välistä eroa. Algoritmi löytää minimin tietyillä optimoinnissa käytettyjen vaikeiden eli aikapisteiden, paikkapisteiden ja aaltomuodon kantafunktioiden lukumäärillä, ja tuottaa pulsseja, joita tässä työssä myös analysoitiin. Algoritmin avulla tuotettiin hyvin yleisesti magneettikuvauksessa käytössä olevat magnetisaatioita 90 ja 180 astetta kääntävät pulssit, jotka yleensä suoritetaan yhden pulssimuotokytken sisällä peräkkäin.

90 astetta magnetisaatioita kääntävä pulssi kääntää magnetisaatioita tarkasti. Valitusta esimerkipulssista riippumatta ideaalien ja simuloitujen magnetisaatioiden väinen kulma pysyy alle puolessa asteessa. Tarkemmassa tarkastelussa huomataan, että magnetisaatiot pysyvät hyvin tarkasti x^*y^* -tasossa. Ero on huomattavasti suurempi x^*y^* -tason suuntaisesti mitattuna kuin x^*z^* -tasossa tarkasteltuna. Kun pulssin toimintaa analysoitiin niin, että mittauksen aikapisteiden määrä kaksinkertaistettiin, sama toistui. Magnetisaatiot päättyivät huomattavasti tarkemmin optimaaliseen suuntaan x^*z^* -tason suhteen kuin x^*y^* -tasossa.

Näiden huomioiden pohjalta todetaan, että optimoinnin kohdefunktion kertoimia muuttamalla virhe voitaisiin tasata paremmin x^*y^* - ja x^*z^* -tasojen kesken. Kuitenkin koska kyseessä on 90 astetta magnetisaatioita kääntävä pulssi, jota yleensä pulssimuotokytkenässä seuraa vähintään yksi magnetisaatioita 180 astetta kääntävä pulssi, on tärkeämpää että magnetisaatiot päättyvät x^*y^* -tasoon. Näin 180 astetta magnetisaatioita kääntävä pulssi kääntää magnetisaatioita tarkimmin niin, että mahdolliset vaihe-erot palautuvat ja signaalista tulee tarkempi.

180 astetta magnetisaatioita kääntävä pulssi kääntää magnetisaatioita hyvin, mutta jättää kuitenkin toivomisen varaa. Suurin rajoitus esimerkipulssien valinnassa on laskenta-aika, sillä vakioiden arvot jouduttiin pitämään pieninä laskennan kompleksisuuden takia. Toisin kuin 90 astetta magnetisaatioita kääntävässä pulssissa, 180 astetta magnetisaatioita kääntävässä pulssissa magnetisaatioita simuloitiin aina kolmessa eri ortogonaalisessa suunnassa. Ortogonaalisten suuntien optimoituessa hyvin myös muiden suuntien päätellään optimoituvan näiden suuntien lineaarikombinaationa.

Pulsseja luodessa tehtiin huomio, että algoritmi löysi pulssin nopeammin ja pulssit toimivat sitä paremmin, mitä pienempi lukumäärä aikapisteitä tai käännettäviä magnetisaatiovektoreita oli. Sama pätee myös 90 astetta magnetisaatioita kääntäviin pulsseihin, vaikka ne toimivatkin huomattavasti 180 astetta magnetisaatiota kääntäviä pulsseja tarkemmin käytettyjen vakioiden arvoista riippumatta.

Kun 180 astetta magnetisaatioita kääntäviä pulsseja tarkasteltiin samoilla vakioi-

den arvoilla kuin millä ne oli luotu, magnetisaatiot asettuivat keskimäärin alle kahden asteen kymmenyksen päähän ideaalista suunnasta. Huomionarvoista on, että paikkapisteiden määrältään kompleksisimman esimerkkipulssin tapauksessa z^* -akselilla tarkasteltavat magnetisaatiot kääntyivät kahta muuta tarkasteltua suuntaa huomnommin. Muissa 180 ja 90 astetta magnetisaatioita kääntävissä esimerkkipulsseissa z^* -akselille käännetyt magnetisaatiot olivat aina kääntyneet suunnista tarkimmin.

Sama huomio tehtiin myös, kun 180 astetta magnetisaatioita kääntävää pulssia tarkasteltiin niin, että aikapisteiden määrä kaksinkertaistettiin. Toisaalta virhe jakautuu tasaisesti kaikkien kolmen ortogonaalisen suunnan suhteen, jolloin tältä ominaisuudeltaan paikkapisteiden määrältään kompleksisinta pulssia voidaan pitää onnistuneena, koska se toimii kuten yksinkertaisemmat pulssit. Huomionarvoista on kuitenkin se, että kaikkien analysoinnissa käytettyjen attribuuttien suhteen kyseinen pulssi oli epätarkin. Myös kun pulsseja tarkastellaan siltä kannalta, kuinka hyvin ne kääntävät $-x^*$ - ja y^* -akselille kuuluvia magnetisaatioita x^*y^* -tasoon, kääntää paikkapisteiltään kompleksisin pulssi magnetisaatioita huonoiten. Muut kaksi paikkapisteiltään huomattavasti yksinkertaisempaa pulssia taas kääntävät magnetisaatioita hyvin tarkasti x^*y^* -tasoon.

Koska pulssit luodaan lähtökohtaisesti MEG-MRI-laitteeseen, on maksimiamplitudin suuruus tärkeää pulssia luodessa. Optimointialgoritmissa amplitudi rajoitettiin kaikkien pulssien kohdalla sataan mikrotelaan. 90 astetta magnetisaatioita kääntäviä pulsseja luova algoritmi tuotti huomattavasti tarkempia ja myös amplitudiltaan matalampia pulsseja kuin 180 astetta magnetisaatioita kääntäviä pulsseja tuottava algoritmi. Valitut 90 astetta magnetisaatioita kääntävät esimerkkipulssit ovat amplitudiltaan kelvollisia Aalto-yliopiston Neurotieteen ja lääketieteellisen tekniikan laitoksen MEG-MRI-laitteeseen.

180 astetta magnetisaatioita kääntävät esimerkkipulssit pysyvät alle amplitudin rajoituksen. Toiveena oli luoda pulsseja, joiden maksimiamplitudi olisi B_0 -kentän luokkaa eli noin 50 mikrotela. Yksinkertaisin, vain yhtä magnetisaatiota suurella määrällä aikapisteitä kääntävän pulssin amplitudi pysyy selvästi alle 50 mikrotela. Hiukan suuremmalla määrällä paikkapisteitä ja yhtä suurella määrällä aikapisteitä luotu pulssi on amplitudiltaan maksimissaan 72 mikrotela, ja ylittää näin 50 mikrotela tavoiteamplitudin. Pienemmällä aikapisteiden määrällä mutta suurimmalla paikkapisteiden määrällä luotu pulssi on amplitudiltaan noin B_0 -kentän vahvuinen.

Työn toteutuksen aikana esille nousi useita mahdollisia jatkotoimia. Muun muassa laskentateho ja -nopeus nousivat ongelmaksi työn edetessä. Koodin parallelisointi ja pohjakoodin tehostaminen voisivat parantaa algoritmin suoritusta ja mahdollistaa pulssien konstruoinnin yhä suuremmilla alkuarvoilla. Tämän lisäksi algoritmille syötettyä alkuarvausta ei varioitu pulsseja luodessa. Alkuarvausta muuttamalla tai antamalla yksinkertaisempaan tutkimusavaruuteen luotu pulssi monimutkaisemman pulssin alkuarvaukseksi voitaisiin mahdollisesti löytää magnetisaatioita tarkemmin kääntäviä pulsseja. Näiden huomioiden lisäksi algoritmin toimintaa aika- ja paikkapisteiden määrän kasvaessa voisi tarkastella löytäen tilanteen, jossa arvot vastaavat mahdollisimman tarkasti todellisuuden mittaolosuhteita. Työn tavoitteena oli myös löytää vielä huomattavasti lyhyempiä pulsseja, mutta tämä jätettiin kuitenkin kandidaatintyön suppeuden ja aikarajoitteen takia tutkimuksen ulkopuolelle.

Viitteet

- [1] Elizabeth A Buffalo, J Anthony Movshon, and Robert H Wurtz. From basic brain research to treating human brain disorders. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 116(52):26167–26172, 2019.
- [2] J Olesen and M Leonardi. The burden of brain diseases in Europe. *European Journal of Neurology*, 10(5):471–477, 2003.
- [3] Zhongming Liu, Lei Ding, and Bin He. Integration of EEG/MEG with MRI and fMRI. *IEEE Engineering in Medicine and Biology Magazine*, 25(4):46–53, 2006.
- [4] Panu T Vesanen, Jaakko O Nieminen, Koos CJ Zevenhoven, Juhani Dabek, Lauri T Parkkonen, Andrey V Zhdanov, Juho Luomahaara, Juha Hassel, Jari Penttilä, and Juha Simola. Hybrid ultra-low-field MRI and magnetoencephalography system based on a commercial whole-head neuromagnetometer. *Magnetic Resonance in Medicine*, 69(6):1795–1804, 2013.
- [5] Koos CJ Zevenhoven, Hui Dong, Risto J Ilmoniemi, and John Clarke. Dynamical cancellation of pulse-induced transients in a metallic shielded room for ultra-low-field magnetic resonance imaging. *Applied Physics Letters*, 106(3):034101, 2015.
- [6] Koos CJ Zevenhoven. Unconventional MRI scanner technology and intelligent dynamics. Doctoral thesis, Aalto University, to be published.
- [7] Koos CJ Zevenhoven. Blochsimu: Bloch equation simulator for e.g. NMR-related simulations (Python module). April 2015.
- [8] Mark E Ladd, Peter Bachert, Martin Meyerspeer, Ewald Moser, Armin M Nagel, David G Norris, Sebastian Schmitter, Oliver Speck, Sina Straub, and Moritz Zaiss. Pros and cons of ultra-high-field MRI/MRS for human application. *Progress in nuclear magnetic resonance spectroscopy*, 109:1–50, 2018.
- [9] Vadim S Zotev, Andrei N Matlashov, Petr L Volegov, Algis V Urbaitis, Michelle A Espy, and Robert H Kraus. SQUID-based instrumentation for ultralow-field MRI. *Superconductor Science and Technology*, 20(11):S367, 2007.
- [10] Brian Hargreaves, Pauline W Worters, Kim Butts Pauly, John M Pauly, Kevin M Koch, and Garry E Gold. Metal induced artifacts in MRI. *AJR. American journal of roentgenology*, 197(3):547, 2011.
- [11] Ilkka Rissanen. Dynamical cancellation of eddy-current transients in ULF-MRI applications. Master’s thesis, Aalto University, School of Science, 2019.
- [12] Koos CJ Zevenhoven, Antti J Mäkinen, and Risto J Ilmoniemi. Superconducting receiver arrays for magnetic resonance imaging. *Biomedical Physics Engineering Express*, 6(1):015016, 2020.

- [13] Andrei N Matlachov, Petr L Volegov, Michelle A Espy, John S George, and Robert H Kraus Jr. SQUID detected NMR in microtesla magnetic fields. *Journal of Magnetic Resonance*, 170(1):1–7, 2004.
- [14] Antti J Mäkinen, Koos CJ Zevenhoven, and Risto J Ilmoniemi. Automatic spatial calibration of ultra-low-field MRI for high-accuracy hybrid MEG–MRI. *IEEE Transactions on Medical Imaging*, 38(6):1317–1327, 2019.
- [15] Hugh D Young and Roger A Freedman. *Sears and Zemansky’s University Physics with Modern Physics*. 13 edition, 2012.
- [16] Robert W Brown, Y-C Norman Cheng, E Mark Haacke, Michael R Thompson, and Ramesh Venkatesan. *Magnetic resonance imaging: physical principles and sequence design*. John Wiley & Sons, 2014.
- [17] Koos CJ Zevenhoven. A compact introduction to magnetic resonance imaging - a lightly theoretical approach. *NBE, Aalto University, Course Tfy-99.7280*, 2016.
- [18] K Long and R McLauchlan. Magnetic resonance imaging. University Lecture, 2021.
- [19] N Jon Shah. *Hybrid MR-PET imaging: systems, methods and applications*. Royal Society of Chemistry, 2018.
- [20] Pauli Virtanen et al. SciPy 1.0: Fundamental Algorithms for Scientific Computing in Python. *Nature Methods*, 17:261–272, 2020.
- [21] Charles R Harris et al. Array programming with NumPy. *Nature*, 585(7825):357–362, September 2020.
- [22] Dieter Kraft. A software package for sequential quadratic programming. deutsche forschungs-und versuchsanstalt für luft-und raumfahrt köln: Forschungsbericht. wiss. berichtswesen d. *DFVLR*, 88, 1988.
- [23] Miao Gong, Fei Zhao, Sanyou Zeng, and Changhe Li. Sequential least squares programming for linear antenna array synthesis: A study of local and global optima. *Available at SSRN 4464456*, May 2023.