

特形脉冲的设计与计算机模拟^{*}

许 峰¹⁾ 黄永仁²⁾

¹⁾ 安徽理工大学数理系, 淮南 232001)

²⁾ 光谱学与波谱学教育部重点实验室, 华东师范大学物理系, 上海 200062)

(2002 年 3 月 1 日收到, 2002 年 4 月 19 日收到修改稿)

根据 Liouville-von Neumann 方程从理论上对特形脉冲做了全面的描述, 提出了一种具体的调幅特形脉冲设计方案: 首先将待设计的脉冲展成一个有限 Fourier 级数, 然后根据 Bloch 方程的解析解准确计算出各阶正弦、余弦波的频谱, 再将这些频谱组合后与该脉冲的理想频谱进行比较构成误差函数, 最后运用鲍威尔-模拟退火组合优化算法计算出全局最优 Fourier 系数, 即可得到所需脉冲的表达式. 应用此设计方案, 得到了体系处于热平衡态时的特形激励脉冲和反转脉冲的具体表达式. 计算机模拟表明, 所得脉冲的频谱具有较好的选择性.

关键词: 核磁共振, 特形脉冲, Bloch 方程, 鲍威尔-模拟退火组合优化算法

PACC: 7600

1. 引言

在选择激励、自旋回波和磁共振成像等核磁共振(NMR)实验中, 往往需要一些特殊的选择性脉冲. 这些脉冲只在选定的频率范围内激发, 且激发强度均匀, 而在此范围之外几乎不激发, 具备以上性质的脉冲通常称为特形脉冲. 早在上世纪 80 年代, 人们就从 Fourier 变换的角度开始对 Gauss-Sinc 型脉冲进行研究^[1-3]. 此后, 人们又从调节位相的角度设计特形脉冲, 并获得了较为满意的结果^[4, 5]. 设计特形脉冲更多采用的是调节脉冲幅度的方法, 但早期的许多调幅脉冲会产生位相梯度, 需用一个 π 脉冲会聚, 后来人们提出用优化的方法设计调幅脉冲^[6-10], 给特形脉冲的设计提供了新的思路. 特形脉冲的研究最近主要集中在纯吸收线型特形脉冲以及各种特形激励脉冲和反转脉冲的设计方面^[11-15]. 本文根据用优化设计特形脉冲的思想, 结合作者的相关研究成果, 提出了一种设计调幅特形脉冲的具体方案: 首先将待设计的脉冲展成一个有限 Fourier 级数, 然后根据 Bloch 方程计算出各阶正弦、余弦波的频谱, 再将其组合后与该脉冲的理想频谱进行比较构成误差函数, 最后运用鲍威尔-模拟退火组合优化算法计算出 Fourier 系数, 即可得到所需特形脉冲的表达式. 在上

述计算过程中, 频谱的计算是根据 Bloch 方程在各种物理条件下完整的解析解进行的, 计算结果较为准确且已得到实验验证, 而采用鲍威尔-模拟退火组合优化算法计算 Fourier 系数, 既可确保所求解为全局最优而非局部最优, 又克服了模拟退火法计算量大、计算时间长的缺陷. 根据上述设计方案, 本文得出了体系处于热平衡状态时的特形激励脉冲和反转脉冲的具体表达式. 计算机模拟表明, 所得脉冲的频谱具有很好的选择性.

2. 特形脉冲的理论描述

为了理论研究的简便, 本文仅考虑单自旋体系, 且由于脉冲时间远小于弛豫时间, 弛豫作用也忽略不计.

在实验室坐标系中, 首先沿 z 轴加一个强度为 B_0 的定磁场, 然后再沿 x 轴加一个强度为 $2\omega_1(t)$ 、频率为 ω 、位相为 $\varphi(t)$ 、脉冲宽度为 τ 的射频场

$$B_1(t) = 2\omega_1(t) \cos[\omega t + \varphi(t)]i, \quad (1)$$

则自旋体系的总哈密顿量 H 由如下两部分组成:

$$H(t) = H_0 + H_1(t), \quad (2)$$

其中 $H_0 = -\omega_0 I_z$, $H_1(t) = -2\omega_1(t) \cos[\omega t + \varphi(t)]I_x$, $\omega_0 = \gamma B_0$, γ 为该自旋的旋磁比.

^{*} 安徽省教育厅自然科学基金(批准号: 2001KJ225ZC)资助的课题.

因为射频场 $B_1(t)$ 可分为左旋场 $\omega_1(t)\cos[\omega t + \varphi(t)]i - \omega_1(t)\sin[\omega t + \varphi(t)]j$ 和右旋场 $\omega_1(t) \times \cos[\omega t + \varphi(t)]i + \omega_1(t)\sin[\omega t + \varphi(t)]j$ 两部分, 而在以 ω 为角速度绕 z 轴旋转的坐标系中(本文采用右手系), 左旋场对体系的贡献甚微, 可以忽略^[16], 因此, 体系的有效场为 $\omega_1(t)\cos[\omega t + \varphi(t)]i + \omega_1(t)\sin[\omega t + \varphi(t)]j + B_0 k$, 将其变换到旋转坐标系下, 则有效哈密顿量为^[16]

$$H_{\text{eff}}(t) = -\Delta\omega I_z - \omega_1(t) \{ \cos\varphi(t) I_x + \sin\varphi(t) I_y \}, \quad (3)$$

其中 $\Delta\omega = \omega_0 - \omega$ 为频偏.

描述自旋体系状态的密度算符 $\sigma(t)$ 满足 Liouville-von Neumann 方程

$$\frac{d\sigma(t)}{dt} = -[H(t), \sigma(t)], \quad (4)$$

其在旋转坐标系下的形式为

$$\frac{d\tilde{\sigma}(t)}{dt} = -[\tilde{H}_{\text{eff}}(t), \tilde{\sigma}(t)]. \quad (5)$$

再将方程(5)转换为相互作用表象形式^[16]

$$\frac{d\tilde{\sigma}(t)}{dt} = -[\tilde{H}_{\text{eff}}(t), \tilde{\sigma}(t)], \quad (6)$$

其中 $\tilde{\sigma}(t) = \exp(-i\Delta\omega I_z t) \sigma(t) \exp(i\Delta\omega I_z t)$, $\tilde{H}_{\text{eff}}(t) = \exp(-i\Delta\omega I_z t) \{ -\omega_1(t) [\cos\varphi(t) I_x + \sin\varphi(t) I_y] \} \exp(i\Delta\omega I_z t) = -\omega_1(t) \exp\{-i[\Delta\omega t + \varphi(t)] I_z\} \{ I_x \cos\varphi(t) + I_y \sin\varphi(t) \} \exp\{i[\Delta\omega t + \varphi(t)] I_z\}$.

一般情况下, 方程(6)的严格解析解不存在, 人们多采用微扰、哈密顿切尾、相干平均等近似方法对其求解. 用微扰方法, 则 $\tilde{\sigma}(t)$ 的一级近似表达式为^[16]

$$\tilde{\sigma}(t) = \tilde{\sigma}(0) - i \int_0^t [\tilde{H}_{\text{eff}}(t'), \tilde{\sigma}(0)] dt'. \quad (7)$$

假设体系的初始状态为热平衡, 即 $\tilde{\sigma}(0) = I_z$, 将

$\tilde{H}_{\text{eff}}(t)$ 代入(7)式, 根据关系式 $[I_x, I_z] = -iI_y$, $[I_y, I_z] = iI_x$, 不难得出

$$\tilde{\sigma}(t) = I_z + \int_0^t \omega_1(t') \{ \cos[\Delta\omega t' + \varphi(t')] I_y - \sin[\Delta\omega t' + \varphi(t')] I_x \} dt'. \quad (8)$$

若固定射频场位相, 不失一般性, 取 $\varphi(t) = 0$, 并考虑到 $t < 0$ 或 $t > \tau$ 时, $\omega_1(t) = 0$, 则(8)式可改写为

$$\tilde{\sigma}(t) = I_z + \text{Re} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \omega_1(t') \exp(-i\Delta\omega t') dt' \right) I_y + \text{Im} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \omega_1(t') \exp(-i\Delta\omega t') dt' \right) I_x, \quad (9)$$

从而可获得如下结论: 从 x 方向对某自旋施加一个位相固定、强度可调的脉冲后, y 和 x 方向的可测频谱 M_y 和 M_x 分别即为脉冲有效强度 Fourier 变换的实部和虚部.

3. 特形脉冲频谱的计算

因为 NMR 谱仪中的射频发生器只能发射有一定宽度的矩形脉冲, 对于非矩形脉冲 $\omega_1(t)$, 通常将其近似为以 $\omega_1(t)$ 为包络的一系列小矩形脉冲, 所以在实验中, 只有矩形脉冲的频谱为脉冲函数的 Fourier 变换, 而对于非矩形脉冲, 若用 Fourier 变换的方法计算其频谱, 则可能产生较大的误差, 这就是理论结果与实验结果的不等价性. 为了确保计算的准确性, 本文应用 Bloch 方程计算特形脉冲的频谱.

在静磁场与恒定射频场共同作用下的单自旋体系满足下列方程:

$$\begin{cases} \frac{dM_x}{dt} = -\frac{1}{T_2} M_x + \Delta\omega M_y, \\ \frac{dM_y}{dt} = -\Delta\omega M_x - \frac{1}{T_2} M_y + \omega_1 M_z, \\ \frac{dM_z}{dt} = -\omega_1 M_y - \frac{1}{T_1} (M_z - M_0), \end{cases} \quad (10)$$

其中 M_x, M_y, M_z 分别为磁化矢量在 x, y, z 轴上的分量, M_0 为体系平衡时的磁化矢量, T_1 和 T_2 分别为纵向、横向弛豫时间, $\Delta\omega$ 为频偏, ω_1 为射频场强度.

方程(10)即为 NMR 中较为经典的 Bloch 方程, 它描述了单自旋体系在射频场和弛豫的共同作用下的运动状态, 在特形脉冲设计、选择性软脉冲、自旋锁定和辐射阻尼等的研究中起着非常重要的作用. 早在 1957 年 Das 和 Saha 就已指出 Bloch 方程可用 Laplace 变换求其解析解^[17], 但由于计算工具的限制, 求取 Bloch 方程在各种不同条件下完整的解析解十分困难, 以至于许多人不得不用数值方法求解 Bloch 方程, 这就大大限制了 Bloch 方程的应用. 随着近年来计算机技术特别是计算机解析语言的发展, 人们陆续开始了 Bloch 方程解析解的计算与研究^[18-20]. 如 Morris 在 1994 年给出了一种 Bloch 方程的解析解^[18], 但其仅仅是特定物理条件下的一种解析解, 且中间变量较多, 不便于分析应用. 本文作者利用计算机解析语言 Reduce, 求出了 Bloch 方程在各种不同物理条件下的 4 种解析解, 该解析解形式

简明 ,便于分析研究 ,所获结果已用于 Gauss-Sinc 型特形脉冲设计实验之中 ,并得到了相应实验的验证^[21]。值得一提的是 ,理论研究和实验均表明 :在射频场的照射下 ,体系的弛豫会受到不同程度的影响^[22-24] ,而弛豫的变化又不可避免地将对频谱产生一定的影响。因此 ,从这个角度分析 ,本文采用同时考虑射频场作用和弛豫作用的 Bloch 方程计算脉冲的频谱较为合适。

将待设计调幅特形脉冲 $\omega_1(t)$ 展成 Fourier 级数

$$\omega_1(t) = \left\{ A_0 + \sum_{n=1}^{\infty} [A_n \cos(n\omega t) + B_n \sin(n\omega t)] \right\} K, \tag{11}$$

其中 $K = 2\pi/\tau$, τ 为脉宽 , $A_0, A_1, A_2, \dots, B_1, B_2, \dots$ 为 Fourier 系数 ,提出因子 K 是出于计算待定系数时归一化的需要。

由于 Fourier 系数 $A_0, A_1, A_2, \dots, B_1, B_2, \dots$ 随着 n 的增大而递减 ,因此在实际计算时 ,只需取 Fourier 级数的有限项作为 $\omega_1(t)$ 的近似值 ,即

$$\omega_1(t) \approx \left\{ A_0 + \sum_{n=1}^N [A_n \cos(n\omega t) + B_n \sin(n\omega t)] \right\} K. \tag{12}$$

根据 Bloch 方程分别求出各阶谐波的频谱 ,再与 Fourier 系数进行组合 ,即可得到 $\omega_1(t)$ 的频谱 $F(\nu, A_0, A_1, \dots, A_N, B_1, \dots, B_N)$,其中 $\nu = \Delta\omega/2\pi$, F 分别为 M_x, M_y, M_z 。

4. Fourier 系数的计算

理论上对于任意待定脉冲 $\omega_1(t)$,只要给出其目标频谱 ,然后与频谱 $F(\omega, A_0, A_1, \dots, A_N, B_1, \dots, B_N)$ 按某种方式构成误差函数 $E(A_0, A_1, \dots, A_N, B_1, \dots, B_N)$ (本文采用目标频谱与 $F(\omega, A_0, A_1, \dots, A_N, B_1, \dots, B_N)$ 的均方差为误差函数) ,再用最优化方法求出 Fourier 系数 $A_0, A_1, \dots, A_N, B_1, \dots, B_N$ 代入(12)式 ,即可求出待定脉冲 $\omega_1(t)$ 。

优化的方法许多 ,各有特点 ,传统的多元优化方法如最速下降法、共轭斜量法、鲍威尔法(Powell method, PM)等算法简单、收敛性好 ,但这些算法对初始值的依赖性较大 ,极易收敛到局部最优解。1953 年 ,Metropolis 根据受热金属冷却时能量变化的规律 ,提出了模拟退火算法(simulated annealing method, SAM)^[25] ,其基本思想是 :1)给定初始状态 X_0 及初

始温度 T_0 ;2)产生随机扰动 ΔX ,得新状态 $X + \Delta X$;3)求新旧状态之间的能量差 $\Delta E = E(X + \Delta X) - E(X)$;4)若 $\Delta E \leq 0$,则接受新状态 ,用 $X + \Delta X$ 代替 X ,且转 2) ,否则以概率 $P(\Delta E) = \exp(-\Delta E/T)$ 来决定是否接受新状态(T 是一个可控参数 ,从 T_0 逐渐降低) ;5)在区间 $[0, 1]$ 上产生一个随机数 ϵ ,若 $P(\Delta E) \geq \epsilon$,则接受新状态 ,否则拒绝新状态。

SAM 现已被证明是一个有效的全局优化算法 ,能以很大的概率求得全局最优解 ,但是该方法需要大量迭代 ,特别是当变量较多时 ,要经过很长时间的计算才能获得最优解。为此 ,本文提出一种将传统的 PM 与 SAM 相结合的组合优化算法 ,其基本思想是 :首先用 PM 进行优化 ,当它陷入局部极值点时 ,转用 SAM 的搜索策略 ,因为它是随机搜索过程 ,可以跳出局部极值点而使目标函数获得更优值 ,这样的点称为更优点 ,获得更优点后马上转入 PM ,依次交替进行 ,这样既可获得全局最优解 ,又可大量减少迭代次数。

5. 特形激励脉冲和特形反转脉冲的设计及计算机模拟

对于处于热平衡状态的单自旋体系 , $M_x = 0, M_y = 0, M_z = 1$,若从 x 方向施加一个脉冲恰好将 M_z 扳转为 M_y ,则这种脉冲即为 NMR 中常用的激励脉冲或 $\pi/2$ 脉冲。现在我们设计一种特形 $\pi/2$ 脉冲 ,其只在一定的频率范围内均匀激发 ,且为纯吸收线型。这种脉冲的理想频谱可定义如下(示意图见图 1) :

$$\begin{cases} M_y(\nu) = 1, & 0 \leq |\nu| \leq 2/\tau, \\ M_{xy}(\nu) = 0, & 3/\tau \leq |\nu| \leq 10/\tau, \end{cases} \tag{13}$$

其中 $2/\tau \leq |\nu| \leq 3/\tau$ 为转换区 ,频谱没有定义 , τ 为脉宽 , $\nu = \Delta\omega/2\pi$ 。

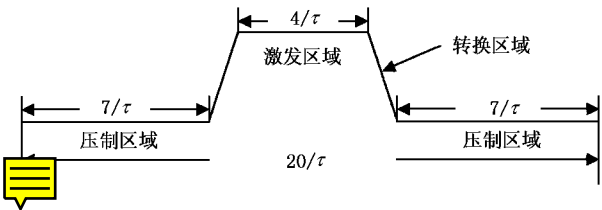


图 1 特形 $\pi/2$ 脉冲理想频谱示意图

对于给定的 N ,用 Bloch 方程计算出(12)式中 $\omega_1(t)$ 的频谱 M_x, M_y, M_z ,然后与(13)式的理想频谱以均方差形式构成误差函数 ,再用鲍威尔-模拟退火

组合优化算法求出 Fourier 系数 $A_0, A_1, \dots, A_N, B_1, \dots, B_N$ 代入(12)式,即可得到所需的特形 $\pi/2$ 脉冲.

计算结果显示,当 $N > 8$ 时, A_N 和 B_N 已接近于零,进一步增加 N 对脉冲的频谱已基本上没有影响.表 1 给出 N 从 1 到 8 时 Fourier 系数的计算结果,其中脉宽 $\tau = 0.1\text{s}$.将这些系数代入(12)式,得到 $\omega_1(t)$ 的表达式,然后再根据 Bloch 方程,即可求出此特形 $\pi/2$ 脉冲的模拟频谱.图 2 至图 4 分别给出 $N = 2, 5, 8$ 时该特形 $\pi/2$ 脉冲的模拟激励频谱.

表 1 特形 $\pi/2$ 脉冲的 Fourier 系数

n	$N=1$	$N=2$	$N=3$	$N=4$	$N=5$	$N=6$	$N=7$	$N=8$
系数 A_n								
0	0.15	0.22	0.22	0.23	0.23	0.23	0.23	0.23
1	0.28	0.72	0.67	0.65	0.70	0.70	0.88	0.89
2		-0.85	-1.12	-1.17	-1.29	-1.38	-1.24	-1.02
3			0.29	0.32	0.36	0.41	-0.04	-0.25
4				0.01	0.02	0.03	0.12	0.14
5					-0.01	-0.01	0.04	0.03
6						-0.02	0.02	0.04
7							-0.03	-0.03
8								0.00
系数 B_n								
1	-0.09	-0.91	-0.89	-0.90	-0.89	-0.88	-0.46	-0.40
2		0.70	0.68	0.64	0.50	0.37	-1.16	-1.42
3			-0.06	-0.02	0.04	0.14	0.71	0.74
4				-0.02	-0.02	-0.04	0.02	0.06
5					-0.04	-0.05	0.02	0.03
6						0.02	-0.05	-0.04
7							0.00	-0.02
8								0.01

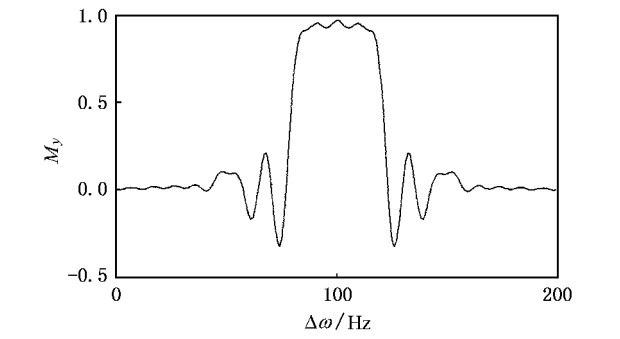


图 2 $N = 2$ 时的模拟激励频谱

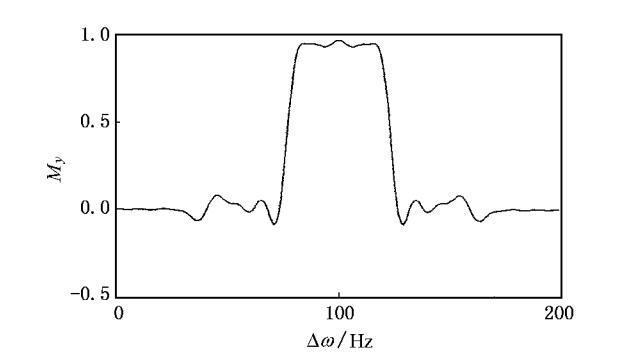


图 3 $N = 5$ 时的模拟激励频谱

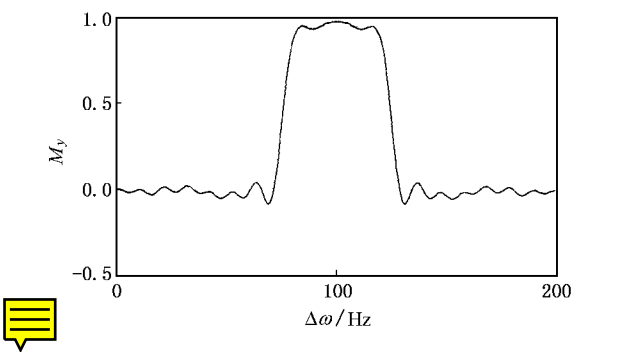


图 4 $N = 8$ 时的模拟激励频谱

在 NMR 中常用的还有反转脉冲或 π 脉冲,这种脉冲将处于热平衡状态的 M_z 扳转为 $-M_z$.若要求反转脉冲只在选定的范围内均匀激发(其频谱示意图见图 5),则这种特形反转脉冲的理想频谱可定义为

$$\begin{cases} M_z(\nu) = -1, & M_{xy}(\nu) = 0, & 0 \leq |\nu| \leq 2\tau, \\ M_z(\nu) = 1, & M_{xy}(\nu) = 0, & 3/\tau \leq |\nu| \leq 10\tau. \end{cases}$$

(14)

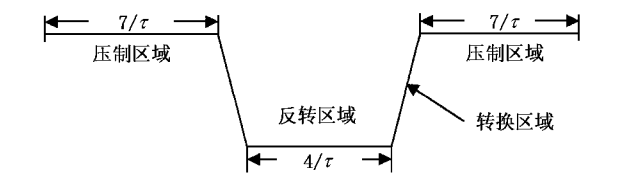


图 5 特形 π 脉冲理想频谱示意图

根据前面的计算方法,同样可求出该特形反转脉冲的表达式,表 2 给出 $N = 9$ 时的 Fourier 系数.图 6 给出所得脉冲的模拟反转频谱.

表 2 特形 π 脉冲的 Fourier 系数

n	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
A_n	0.50	0.74	-0.20	-0.92	0.12	-0.03	-0.04	0.01	-0.02	-0.01
B_n		-1.52	1.00	-0.31	-0.03	0.08	-0.05	0.00	0.01	-0.01

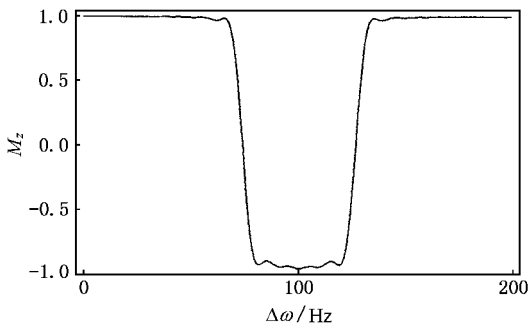


图 6 $N = 9$ 时的模拟反转频谱

将图 4 和图 6 分别与图 1 和图 5 对照可知,按照本文提出的设计方案计算出的特形激励脉冲和特形反转脉冲的频谱与其理想频谱几乎完全一致.设计出的脉冲只在选定的范围($4/\tau = 40\text{Hz}$)内激发,且激发较为均匀,频谱的边瓣极小,在选定的范围外几乎不激发,其选择性大大优于长脉冲、Gauss-Sinc 脉冲和 Dante 序列等其他选择性脉冲.

[1] Bauer C *et al* 1984 *J. Magn. Res.* **58** 442

[2] Temps A J and Brewer C F 1984 *J. Magn. Res.* **56** 335

[3] Warren M S 1984 *J. Chem. Phys.* **81** 5437

[4] Ngo J T and Morris P G 1987 *Magn. Res. Med.* **5** 217

[5] Emsley L and Bodenhausen G 1990 *Chem. Phys. Lett.* **165** 469

[6] Geen H and Freeman R 1990 *J. Magn. Res.* **87** 415

[7] Geen H and Freeman R 1991 *J. Magn. Res.* **93** 93

[8] Geen H and Bohlen J 1997 *J. Magn. Res.* **125** 376

[9] Rosenfeld D and Panfil S 1997 *J. Magn. Res.* **126** 221

[10] Lunati E , Cofrancesco P and Villa M 1998 *J. Magn. Res.* **134** 223

[11] Vosegaard T , Florian P and Grandinetti P J 2000 *J. Magn. Res.* **143** 217

[12] Pueressmann K P , Golay X and Stuber M 2000 *J. Magn. Res.* **144** 189

[13] Carlson J W 2000 *J. Magn. Res.* **147** 210

[14] Parella T and Bolloc J 2001 *J. Magn. Res.* **148** 78

[15] Zangger K , Oberer M and Sterk H 2001 *J. Magn. Res.* **152** 48

[16] Huang Y R 1992 *The Principle of NMR Theory* (Shanghai : Publish -ing House of East China Normal University) pp227 , 229 , 231 [黄永仁 1992 核磁共振理论原理(上海:华东师范大学出版社)第 227 , 229 , 231 页]

[17] Saha A K and Das J R 1957 *Theory and Applications of Nuclear Induction*(India :Saha Institute of Nuclear Physics Calcutta)

[18] Morris G A and Chilvers P B 1994 *J. Magn. Res. A* **107** 236

[19] Mao X A and Guo J X 1994 *Phys. Rev. B* **49** 15702

[20] Mao X A , Guo J X and Ye C H 1994 *Chem. Phys. Lett.* **218** 249

[21] Huang Y R *et al* 1996 *Chin. J. Magn. Res.* **13** 153(in Chinese) [黄永仁等 1996 波谱学杂志 **13** 153]

[22] Xu F and Huang Y R 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 415(in Chinese) [许 峰、黄永仁 2002 物理学报 **51** 415]

[23] Xu F and Huang Y R 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 1371(in Chinese) [许 峰、黄永仁 2002 物理学报 **51** 1371]

[24] Xu F , Liu Y L and Huang Y R 2002 *J. Jilin University (Science Edition)* **40** 75 (in Chinese) [许 峰、刘玉林、黄永仁 2002 吉林大学学报(理学版) **40** 75]

[25] Metropolis N and Rosenbluth A 1953 *J. Chem. Phys.* **21** 1087

The design and computer simulation of a shaped pulse^{*}

Xu Feng¹⁾ Huang Yong-Ren²⁾

¹⁾ *Department of Mathematics and Physics, Anhui University of Science and Technology, Huainan 232001, China*

²⁾ *Key Laboratory for Optical and Magnetic Resonance Spectroscopy, Ministry of Education of China and Department of Physics, East China Normal University, Shanghai 200062, China*

(Received 1 March 2002 ; revised manuscript received 19 April 2002)

Abstract

An overall theoretical description of a shaped pulse is given, and a concrete design scheme of a shaped pulse is presented: A desired shaped pulse is expanded as a finite Fourier series and its frequency domain profile is calculated according to the analytical solutions of Bloch equations. The profile is compared with the desired target profile to give a multidimensional error function. The Powell-simulated annealing optimization algorithm is then used to find the global minimum on this function. Finally, the desired shaped pulse is gained. In this manner, a shaped excitation pulse and a shaped inverse pulse in common use of NMR are designed. The simulation results show that these pulses have good selectivity and the excitation can be guaranteed to be uniform across the effective bandwidth and of a constant phase.

Keywords : NMR, shaped pulse, Bloch equations, Powell-simulated annealing optimization algorithm

PACC : 7600

^{*} Project supported by the Natural Science Foundation of the Education Bureau of Anhui Province, China (Grant No. 2001KJ225ZC).