

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS

Caio Cesar Fernandes Marques

Implementação em Python da Transformada Inversa de Laplace para Decomposição
de Sinais de Relaxometria de Ressonância Magnética

São Carlos

2025

Caio Cesar Fernandes Marques

Implementação em Python da Transformada Inversa de Laplace para Decomposição
de Sinais de Relaxometria de Ressonância Magnética

Trabalho de conclusão de curso apresentado ao
Instituto de Física de São Carlos da Universidade de
São Paulo para obtenção do título de Bacharel em
Física Computacional.

Orientador: Prof. Dr. Alberto Tannús - USP

São Carlos

2025

AUTORIZO A REPRODUÇÃO E DIVULGAÇÃO TOTAL OU PARCIAL DESTE TRABALHO, POR QUALQUER MEIO CONVENCIONAL OU ELETRÔNICO PARA FINS DE ESTUDO E PESQUISA, DESDE QUE CITADA A FONTE.

RESUMO

A Relaxometria por Ressonância Magnética (RM) busca caracterizar substâncias pelos seus tempos de relaxação característicos. Algumas amostras possuem mais de um tempo de relaxação, resultando em uma distribuição poliexponencial de tempos característicos. A decomposição destas curvas é um problema matemático mal-posto que pode ser abordado utilizando a Transformada Inversa de Laplace (*Inverse Laplace Transform*, ou ILT, do inglês). Este trabalho apresenta uma implementação em Python da ILT, utilizando uma Decomposição de Valor Singular (*singular value decomposition*, ou SVD, do inglês) para calcular a solução da minimização de Tikhonov. Também foi implementado o método da curva-L, que auxilia na escolha do parâmetro de minimização do algoritmo da ILT. Este trabalho tem como finalidade criar uma ferramenta da ILT que possa ser acrescentada ao sistema do espectrômetro digital DMRS, desenvolvido no CIERMag. Para testar os métodos propostos, foram efetuados testes sobre dados sintéticos gerados computacionalmente em Python. Além dos testes sintéticos, também foram testados dados reais de sequências *Inverse Recovery* (IR) e *Carr-Purcell-Meiboom-Gill* (CPMG) sobre amostras de água desmineralizada e óleo mineral. Os testes sintéticos revelaram que a abordagem escolhida é capaz de decompor sinais exponenciais com sucesso, desde que os tempos de relaxação não sejam muito próximos, muito curtos ou possuam amplitudes muito diferentes. Nos testes experimentais, foram encontrados os valores das constantes de relaxação $T_1 = 3.5 \pm 0.1 \text{ s}$ e $T_2 = 1.98 \pm 0.8 \text{ s}$ para a água desmineralizada e $T_1 = 0.15 \pm 0.04 \text{ s}$ e $T_2 = 0.16 \pm 0.3 \text{ s}$ para o óleo mineral. Adicionalmente, foi verificado que a curva-L é capaz de fornecer uma estimativa consistente para o parâmetro de minimização, mas que o refinamento manual deste parâmetro ainda é necessário na maior parte dos casos. Como perspectiva futura, pretende-se verificar a eficiência da ILT para amostras bidimensionais.

Palavras-chave: Ressonância Magnética Nuclear, Inversa de Laplace, Python

1 INTRODUÇÃO

A Ressonância Magnética Nuclear (RMN) é uma ferramenta útil em várias áreas de pesquisa e da medicina, que oferece métodos não invasivos para a análise de diversos tipos de amostra. Através de técnicas de RMN é possível estudar a estrutura molecular e o perfil bioquímico de diferentes materiais, como sementes [1] e meios porosos [2]. Dentro de RMN, a relaxometria é uma área que busca caracterizar substâncias pelos seus tempos característicos de relaxação. Diversas substâncias apresentam apenas um destes tempos característicos, podendo ser modeladas por uma curva monoexponencial. No entanto, é comum observar substâncias que possuem mais de um tempo de relaxação, cada um com sua respectiva contribuição exponencial para o sinal experimental, resultando numa curva de caráter poliexponencial. Com este sinal em mãos, é de interesse do pesquisador decompor esta curva poliexponencial em suas várias curvas constituintes, assim encontrando os diversos tempos de relaxação que compõem a amostra. No entanto, decompor sinais poliexponenciais é uma tarefa mal-posta [3,4], que admite infinitas soluções distintas. Partindo do princípio que a realidade física da amostra é idealmente modelada por apenas uma das soluções possíveis, é necessário introduzir uma ferramenta que ofereça meios para navegar entre as diversas soluções do problema. Tipicamente, esta decomposição é feita através da Transformada Inversa de Laplace (*Inverse Laplace Transform*, ou *ILT*, do inglês).

Neste trabalho, foi feita uma implementação computacional da ILT em Python. A implementação escolhida utiliza a Regularização de Tikhonov [5], e visa ser implementada no sistema do CIERMag, especificamente como parte do Digital Magnetic Resonance Spectrometer (DMRS). Além da implementação da ILT, também foi feita a implementação da curva-L, uma ferramenta numérica capaz de fornecer uma estimativa consistente para o parâmetro de minimização, para auxiliar a utilização da ILT. Com o intuito de testar as ferramentas implementadas foram feitos testes com dados sintéticos compostos por curvas exponenciais geradas em Python, além de testes feitos sobre dados reais, obtidos de sequências IR e CPMG de amostras de água desmineralizada e óleo mineral.

Os testes sintéticos revelaram que a abordagem escolhida é capaz de decompor sinais exponenciais com sucesso, desde que os tempos de relaxação não sejam muito próximos, muito curtos ou de amplitudes muito diferentes. Nos testes experimentais, foram encontrados os valores das constantes de relaxação $T_1 = 3.5 \pm 0.1 \text{ s}$ e $T_2 = 1.98 \pm 0.8 \text{ s}$ para a água desmineralizada e $T_1 = 0.15 \pm 0.04 \text{ s}$ e $T_2 = 0.16 \pm 0.3 \text{ s}$ para o óleo mineral. O que

revela que a atual versão da ILT é capaz de encontrar corretamente tempos de relaxação de amostras monoexponenciais. Como objetivo futuro, buscamos melhorar a implementação da ILT para amostras poliexponenciais além de implementar a ILT 2D capaz de gerar mapas de correlação entre os tempos de relaxação.

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

2.1 Precessão de Larmor

Os fenômenos de RMN são observados em partículas que possuem momento magnético $\vec{\mu}$ e momento angular associado $\vec{I} = \vec{\mu}/\gamma$, onde γ é a constante giromagnética característica de cada núcleo. Quando posicionamos o núcleo em uma região com um campo magnético externo \vec{B}_0 , a interação entre este campo e o momento $\vec{\mu}$ gera na partícula um torque $\vec{\tau}$ que, aplicado ao momento angular \vec{I} , dá origem à equação (1):

$$\vec{\tau} = \gamma \vec{I} \times \vec{B}_0 \quad (1)$$

A resposta da partícula é o movimento de precessão do vetor $\vec{\mu}$ em torno do eixo de \vec{B}_0 , como representado na figura (1). Este movimento é chamado de precessão de Larmor, que ocorre a uma frequência específica, dada pela expressão (2) denominada frequência de Larmor.

$$\omega_0 = \gamma |\vec{B}_0| \quad (2)$$

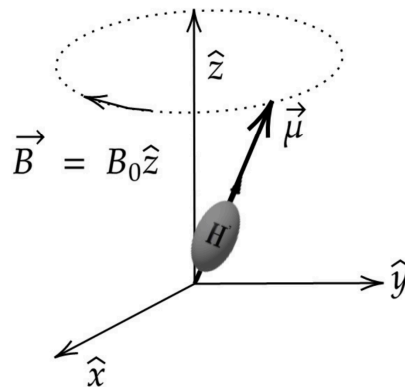


Figura 1: Representação do momento magnético de uma partícula precessionando em torno do eixo de um campo magnético $\vec{B}_0 = B_0 \hat{z}$. Fonte: adaptado de Marcolan, J. [6]

Quando submetido a um campo magnético externo, o momento magnético do núcleo é forçado para um de dois autoestados possíveis, de acordo com o Hamiltoniano de Zeeman: com alinhamento paralelo ou antiparalelo ao campo. O estado paralelo possui menor energia e é mais provável. Nesta configuração, as partículas se tornam capazes de absorver energia, saltando para um estado mais energético. Utilizando campos magnéticos de curta duração (pulsos) é possível forçar transições para o estado antiparalelo, desde que a energia fornecida pelo pulso seja exatamente a energia de transição. Para tal, a frequência do pulso precisa ser exatamente a frequência de Larmor. Essa frequência está situada na faixa das radiofrequências (RF), sendo proporcional à intensidade do campo e a constante giromagnética núcleo. Para o caso do próton do Hidrogênio (^1H), a constante giromagnética vale 42.57 MHz/T.

Quando submetidos a esse campo magnético externo, a maioria dos momentos magnéticos da amostra é forçada para o estado paralelo a \hat{z} , como ilustrado na figura (2). Nesta configuração, surge um vetor de magnetização total \vec{M} , dado pela soma de todos os momentos magnéticos da amostra, como ilustrado em (3):

$$\vec{M} = \sum_i^N \vec{\mu}_i \quad (3)$$

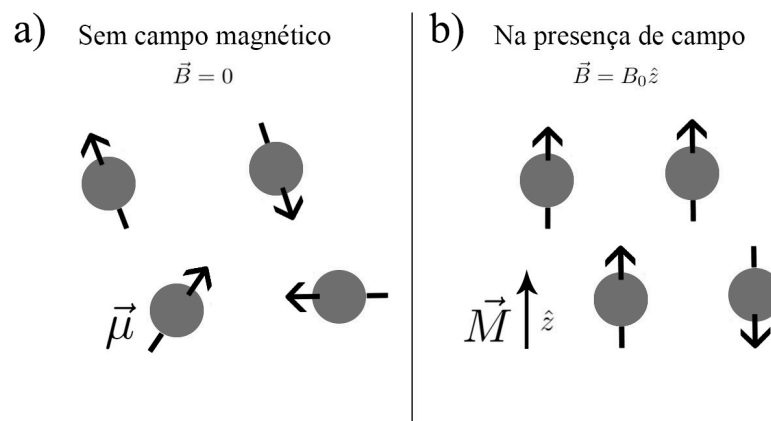


Figura 2: a) Representação dos spins na ausência de campo magnético, sem alinhamento definido. b) Representação dos submetidos a um campo magnético, alinhados a \hat{z} e dando origem ao vetor \vec{M} . Fonte: Elaborada pelo autor.

2.2 Relaxometria

A relaxometria por Ressonância Magnética é o estudo do retorno da magnetização à condição de equilíbrio após a aplicação de um pulso de excitação. Substâncias variadas apresentam

tempos de relaxação distintos, fazendo com que relaxometria possa ser usada para estudar a concentração destas substâncias em várias amostras.

A aplicação de um pulso de RF faz com que o vetor de magnetização \vec{M} saia da situação de equilíbrio termodinâmico, ou seja, alinhada com o campo magnético externo, e passe a precessionar no plano transversal, ortogonal a direção do campo externo. O que observamos do referencial do laboratório é um tombamento do vetor \vec{M} , que agora passa a descrever um ângulo θ com relação a \hat{z} , denominado *flip angle*, como visto na figura (3). Esta nova direção de \vec{M} dá origem a uma componente transversal da magnetização.

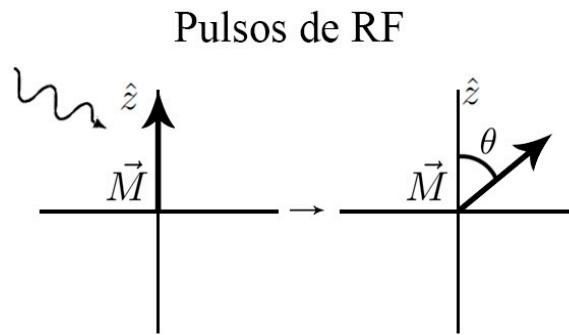


Figura 3: Representação do vetor magnetização total tombando por um *flip angle* θ . Fonte: Elaborada pelo autor

Após o término do pulso de RF, a magnetização tende a retornar a sua posição de equilíbrio termodinâmico, paralela a \hat{z} . Durante este processo, ocorrem tanto a perda da componente transversal quanto a recuperação da componente longitudinal da magnetização. Estes processos ocorrem por fenômenos físicos distintos e são modelados por tempos característicos distintos. O estudo destes processos, sua medição e modelagem formam a base da área da relaxometria de RMN.

A recuperação longitudinal da amostra é dada pela interação spin-rede, que dissipa a energia ganha pelos núcleos, permitindo que o vetor retorne à posição relaxada. Este processo é mapeado por uma constante de tempo denominada T_1 , que pode ser medida por experimentos de recuperação inversa (*inverse recovery, IR*). Neste caso, o sinal obtido possui o formato de uma curva de recuperação exponencial, dado pela equação (4) e exemplificado na figura (4b):

$$S(t) = S_0 [1 - \exp(-t/T_1)] \quad (4)$$

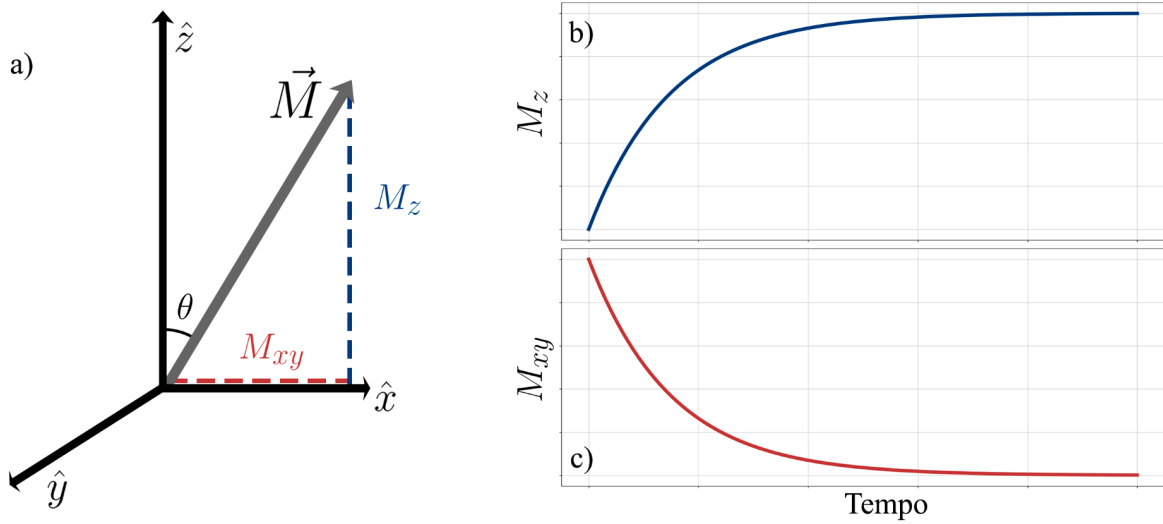


Figura 4: a) Representação do retorno da magnetização \vec{M} à direção \hat{z} . b) Gráfico ilustrativo da recuperação da componente longitudinal M_z ao longo do tempo. c) Gráfico ilustrativo da perda da componente transversal da magnetização M_{xy} ao longo do tempo. Fonte: Elaborada pelo autor

Já a perda da componente transversal se dá pela interação spin-spin, que causa inhomogeneidades no campo magnético e acarreta em pequenas variações locais da frequência de Larmor. Deste modo, pouco após a aplicação do pulso de RF, a precessão dos spins perde coerência de fase, de modo que suas componentes transversais passam a apontar para direções aleatórias. Neste ponto, a componente transversal do vetor \vec{M} foi completamente perdida. Este processo de perda é dado por uma constante de tempo denominada T_2 , que pode ser medida por experimentos de eco de spin, como a sequência Carr-Purcell-Meiboom-Gill (CPMG). Aqui, o sinal obtido é uma curva de decaimento exponencial, dado pela equação (5) e exemplificado em (4c):

$$S(t) = S_0 \exp(-t/T_2) \quad (5)$$

2.3 A Transformada Inversa de Laplace

Diversos tipos de amostras como sementes [1] ou até mesmo o sistema nervoso [7], possuem mais de um tempo de relaxação, resultando em um sinal poliexponencial que não pode mais ser decomposto por um fitting exponencial simples. A decomposição destas curvas é um problema matemático mal-posto, pois existem infinitas maneiras diferentes de decompô-las. Deste modo, é necessário desenvolver uma ferramenta de análise que não somente consiga decompor o sinal poliexponencial, mas que também ofereça algum recurso para tentar navegar entre as diversas soluções indesejadas do problema.

1.2.1 Integrais de Fredholm

A teoria por trás do uso da ILT é melhor explicada com o uso das Integrais de Fredholm do primeiro tipo [3]. Elas são uma classe de equações integrais que busca reconstruir uma função $f(x)$ através da expressão exibida em (6):

$$f(x) = \int_0^{\infty} \phi(t)K(x, t)dt \quad (6)$$

Onde $K(x, t)$ é a função de kernel, que confere o formato geral da função f ; e $\phi(t)$ é o mapa de amplitudes, que informa os valores relevantes do kernel para a integração em t .

Para um sinal de decaimento exponencial $S(t)$ (como dado pela expressão (5)), o kernel correspondente é dado por (7):

$$K(T_2, t) = \exp(-t/T_2) \quad (7)$$

Onde T_2 indica a constante característica de decaimento.

É possível então, reconstruir o sinal S através da ação deste kernel sobre um mapa de amplitudes $\phi(T_2)$:

$$S(t) = \int_0^x \phi(T_2) \exp(-t/T_2) dT_2 = \mathcal{L}\{\phi(T_2)\} \quad (8)$$

Como evidenciado em (8), a integral de Fredholm para uma curva exponencial decrescente é equivalente à transformada de Laplace do mapa de amplitudes. Em um cenário experimental, $S(t)$ é conhecido, enquanto $\phi(T_2)$ precisa ser descoberto.

Como nos interessamos especificamente no mapa $\phi(T_2)$, podemos isolá-lo em (8) através da Transformada Inversa de Laplace.

$$\phi(T_2) = \mathcal{L}^{-1}\{S(t)\} \quad (9)$$

1.2.2 Regularização de Tikhonov

Para este trabalho foi escolhida a Regularização de Tikhonov como ferramenta de inversão, segundo a abordagem proposta em [4].

Para que possa ser tratado computacionalmente, o problema deve ser discretizado. Da discretização de (8), surge a equação matricial (10):

$$s = kf \quad (10)$$

Onde s é o vetor de magnitudes, obtido experimentalmente, k é a versão matricial do kernel e f o mapa vetorial de amplitudes. Apenas s e k são conhecidos.

Para a resolução do sistema (10), utilizamos a Regularização de Tikhonov:

$$\operatorname{argmin}_f \left[\|kf - s\|^2 + \alpha \|f\|^2 \right] \quad (11)$$

Na regularização (11) o primeiro termo é o termo de resíduo e equivale ao método dos mínimos quadrados. O segundo termo é o termo da norma, que visa penalizar soluções com norma grande. A regularização de Tikhonov se baseia na hipótese de que a solução correta do problema é suave e de norma pequena.

O parâmetro α introduzido na expressão (11) pode ser ajustado para se obter mais ou menos atenuação sobre a solução. Quando α é pequeno, o termo de norma pouco atua na minimização e a resposta obtida é ruidosa, similar à resposta dos mínimos quadrados. Quando α é grande, o termo da norma é supervalorizado em relação ao termo do resíduo, resultando numa resposta excessivamente atenuada, com perda de detalhamento. Este fenômeno é conhecido como sobre-atenuação.

Pela natureza mal-posta do problema, não existe critério exato para se determinar o valor de α , mas ainda é possível utilizar métodos auxiliares, como a curva-L, para se estimar palpites iniciais.

1.2.3 Decomposição do Valor Singular (SVD)

A regularização de Tikhonov pode ser implementada através de uma Decomposição de Valor Singular (*Singular Value Decomposition*, ou *SVD*, do inglês) [4], que permite encontrar a solução com uma quantidade reduzida de dados:

A SVD consiste em decompor uma matriz arbitrária, k , em três outras: Σ , U e V , de acordo com (12):

$$k = U\Sigma V^T \quad (12)$$

A matriz U contém os vetores singulares à esquerda de k em suas colunas, enquanto a matriz V contém os vetores singulares à direita de k em suas colunas. Σ é diagonal e contém os valores singulares de k em ordem decrescente.

Utilizando a SVD para decompor a matriz de kernel k , é possível descrever o vetor de soluções, f , como o somatório (13), que é análogo à minimização (11):

$$\sum_{i=1}^{posto(A)} \gamma_i (u_i^T s v_i) / \sigma_i \quad (13)$$

Em (13), u_i e v_i são os i -ésimos vetores singulares das matrizes U e V , σ_i é o i -ésimo valor singular de Σ e γ_i é um fator de filtro proporcional a α , com formato:

$$\gamma_i = \sigma_i^2 / (\sigma_i^2 + \alpha^2) \quad (14)$$

1.3 O método da Curva-L

Como mencionado, não existe um método exato para se determinar o parâmetro α . Mesmo assim, existem ferramentas que podem gerar palpites iniciais para este parâmetro, como é o caso do método da curva-L [4,8]

O método da curva-L consiste em acompanhar individualmente o termo do resíduo e o termo de norma da expressão (11) ao longo de várias transformadas sobre um mesmo conjunto de dados, feitas com α variado. Denotamos $\rho(\alpha)$ e $\eta(\alpha)$ o resíduo e a norma obtidos para um dado valor de α .

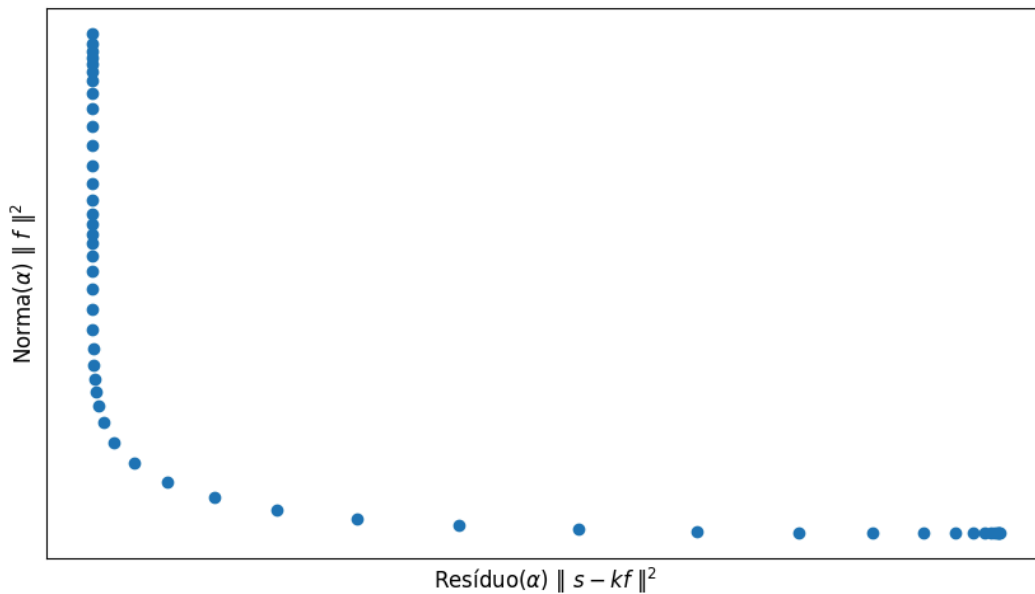


Figura 5: Gráfico de curva-L. Plot paramétrico da norma(α) x resíduo(α). Fonte: Elaborado pelo autor.

Com estes vetores, é feito um plot paramétrico, da forma $(\rho(\alpha), \eta(\alpha))$, que tipicamente resulta em um gráfico com uma curva em formato de “L”, como visto na figura (5).

O gráfico evidencia que para α muito grande ou muito pequeno, um dos termos domina a solução. O método se baseia na hipótese de que a melhor solução seria balanceada, com norma e resíduo de igual importância na minimização. Assim, estimamos que o melhor valor de α se encontra no ponto de maior curvatura do gráfico, onde nenhum dos termos domina a solução. Deste modo, após feito o gráfico, é possível encontrar α com a fórmula para a curvatura:

$$\kappa(\alpha) = \frac{\rho'\eta'' - \rho''\eta'}{((\rho')^2 + (\eta')^2)^{3/2}} \quad (15)$$

Onde as linhas indicam derivadas em relação a α .

3 MATERIAIS E MÉTODOS

2.1 Testes com dados sintéticos

A fim de compreender os limites da ILT em várias situações, foram feitos testes com dados sintéticos, gerados numericamente em Python, através da implementação de classes customizadas para criação de curvas exponenciais. Para a geração dos dados, foi utilizada a relação (10), onde desta vez queremos realizar a multiplicação direta, kf , para se obter o sinal s desejado. Para todos os testes, foi utilizado o kernel k descrito na relação (7), enquanto o vetor de amplitudes f foi gerado individualmente para cada teste.

Para gerar os mapa de amplitudes, foi feita uma sobreposição de distribuições log-normais, dadas pela função de densidade de probabilidade (16):

$$\frac{1}{x\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(\ln x - \mu)^2}{2\sigma^2}\right) \quad (16)$$

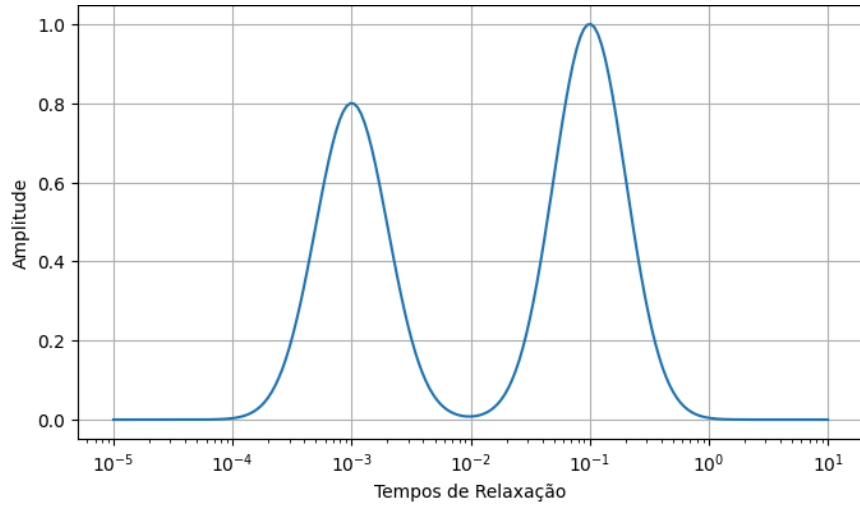


Figura 6: Exemplo de sobreposição de dois picos log-normais, centrados em 10^{-3} e 10^{-1} . Fonte: Elaborada pelo autor

A expressão (16) descreve uma distribuição com um pico de desvio σ , centrado em μ e simétrico em um espaço logarítmico. Várias distribuições são sobrepostas para se criar um mapa de amplitudes poliexponencial, que é então multiplicado pelo kernel k , dando origem a um sinal s poliexponencial.

Para entender o funcionamento da ILT em condições mais realistas, todos os sinais gerados e testados foram acrescidos de ruído gaussiano simétrico, de amplitude igual a 1% da amplitude do sinal, simulando uma relação sinal-ruído de 1 para 100. Foram gerados dois grupos de dados sintéticos: com 2 e com 3 tempos de relaxação. A fim de testar uma ampla gama de casos, cada um dos grupos se subdivide em 4 famílias distintas: Família I: picos próximos com amplitudes próximas; Família II: picos próximos com amplitudes distintas; Família III: picos distantes com amplitudes próximas e Família IV: picos distantes com amplitudes distintas. Os parâmetros das curvas do grupo bi-exponencial constam na tabela (1), enquanto os parâmetros das curvas do grupo tri-exponencial constam na tabela (2):

| Família | Tempos de decaimento | | Amplitudes | | Sigmas | |
|---------|----------------------|--------------------|------------|-----|--------|------|
| I | 8×10^{-2} | 2×10^{-2} | 0.5 | 0.5 | 0.30 | 0.15 |
| II | 2×10^{-3} | 9×10^{-3} | 0.3 | 1.0 | 0.30 | 0.30 |
| III | 2×10^{-1} | 4×10^{-1} | 1.0 | 0.8 | 0.40 | 0.40 |
| IV | 8×10^{-3} | 5×10^{-1} | 0.6 | 2.0 | 0.30 | 0.30 |

Tabela 1: Parâmetros das curvas bi-exponenciais sintéticas: valor médio, amplitude e desvio padrão das distribuições log-normais utilizadas para modelar as curvas das quatro famílias utilizadas.

| Família | Tempos de Decaimento | | | Amplitudes | | | Sigmas | | |
|---------|----------------------|----------------------|--------------------|------------|-----|-----|--------|------|------|
| I | 4×10^{-3} | 1×10^{-2} | 6×10^{-2} | 1.2 | 1.0 | 0.8 | 0.30 | 0.30 | 0.30 |
| II | 9×10^{-3} | 2×10^{-2} | 5×10^{-2} | 0.2 | 0.5 | 1.4 | 0.20 | 0.20 | 0.20 |
| III | 1.4×10^{-1} | 8×10^{-2} | 6×10^{-3} | 1.0 | 0.9 | 1.1 | 0.30 | 0.40 | 0.50 |
| IV | 7.5×10^{-2} | 1.5×10^{-3} | 7×10^{-1} | 2.0 | 0.6 | 2.2 | 0.2 | 0.4 | 0.2 |

Tabela 2: Parâmetros das curvas tri-exponenciais sintéticas: valor médio, amplitude e desvio padrão das distribuições log-normais utilizadas para modelar as curvas das quatro famílias utilizadas.

2.1 Testes com dados reais

Além dos testes com dados sintéticos, também foram feitos testes com amostras reais. Foram testadas amostras de água desmineralizada, óleo mineral, além de uma amostra combinada de água e óleo, numa concentração de 4 partes de água para 1 de óleo. Os dados foram coletados com experimentos de IR e CPMG, feitos pela aluna Maria Vitória Lima da Silva, aluna de iniciação científica do CIERMag, como parte de seu trabalho de conclusão de curso. A coleta de dados foi efetuada inteiramente no espectrômetro DMRS, com campo $B_0 = 0.54$ T, operando na frequência de 23,25 MHz, para núcleos de Hidrogênio (^1H), mas com ajuste fino de frequência para cada uma das amostras. Os pulsos de RF foram calibrados para a duração de 30 μs com amplitudes dos pulso de 180° e 90° devidamente ajustadas. Os parâmetros de aquisição das sequências podem ser encontrados nas tabelas (3), para CPMG, e (4) para IR.

| CPMG | | | |
|------------------|--------|--------|-------------|
| | Água | Óleo | Água + Óleo |
| TR (ms) | 60 000 | 50 000 | 35 000 |
| TE (ms) | 15 | 5 | 14 |
| Número de Ecos | 800 | 300 | 800 |
| Número de pontos | 64 | 64 | 64 |
| Médias | 4 | 4 | 4 |

Tabela 3: Parâmetros de aquisição das sequências CPMG da amostra de água, de óleo e de água e óleo misturados.

| IR | | | |
|------------------|--------|--------|-------------|
| | Água | Óleo | Água + Óleo |
| T Min (ms) | 1 | 1 | 1 |
| T Max (ms) | 25 000 | 70 000 | 23 000 |
| TR (ms) | 40 000 | 50 000 | 35 000 |
| Repetições | 40 | 60 | 40 |
| Número de pontos | 64 | 64 | 64 |
| Médias | 4 | 4 | 4 |

Tabela 4: Parâmetros de aquisição das sequências IR da amostra de água, de óleo e de água e óleo misturados.

2.2 O DMRS

Existem diversas opções comerciais de espectrômetros de RMN, fornecidos por empresas como Bruker ou Siemens. Apesar destas máquinas serem confiáveis, elas oferecem poucas opções de sequências experimentais, além de não oferecerem quase nenhuma customização destas sequências. Para contornar essa falta de opções, o CIERMag desenvolveu o DMRS [9], um espectrômetro digital de design e produção própria. Feito com hardware programável (*field programmable gate arrays*, ou FPGAs), o DMRS foi idealizado para permitir a aplicação de quaisquer sequências de pulsos que o usuário desejar.

Para tal, foi desenvolvido o software PyMR [10], um framework que permite o gerenciamento de experimentos e a criação de novas sequências de pulsos. Também foi desenvolvida no CIERMag a “F language”, uma linguagem de programação dedicada à criação de novas sequências de pulsos.

4 RESULTADOS

3.1 Dados Sintéticos

As figuras (7) até (10) exibem as distribuições sintéticas descritas nas tabelas (1) e (2), decompostas através da ILT. Em todas as figuras, a coluna da esquerda exibe a distribuição original, a coluna do meio exibe a decomposição obtida com α gerado pela curva-L (α_L) e a coluna da direita exibe a decomposição com α ótimo (α_M), encontrado manualmente.

3.1.1 Família I

A figura (7) demonstra que a ILT possui dificuldade em definir tempos de relaxação muito próximos, isto é, dentro da mesma ordem de grandeza. Através da análise dos gráficos é possível notar que mesmo quando a ILT falha em dividir picos próximos, a resposta obtida é geralmente um único pico largo, que engloba os tempos de relaxação dos dois picos individuais. Assim, mesmo que a ferramenta não consiga diferenciar entre tempos próximos, ela ainda consegue apontar em qual região estão os tempos de relaxação da amostra.

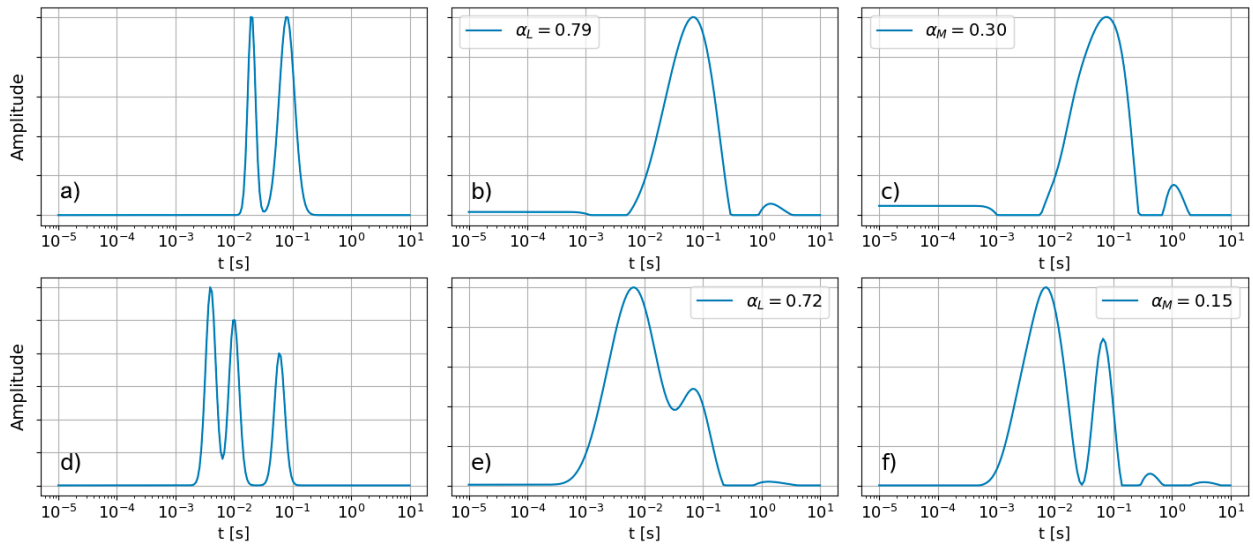


Figura 7: ILTs sobre a Família I: a) Distribuição bi-exponencial original; b) Distribuição bi-exponencial obtida com α_L ; c) Distribuição bi-exponencial obtida com α_M ; d) Distribuição tri-exponencial original; e) Distribuição tri-exponencial obtida com α_L ; f) Distribuição tri-exponencial obtida com α_M . Fonte: Elaborada pelo Autor

3.1.2 Família II

Na figura (8) novamente observamos a tendência de ILT de agregar picos próximos em um pico geral mais largo. Aqui, este efeito é ainda mais pronunciado, pois os picos pequenos possuem contribuições menores, que dificilmente são percebidas pela ferramenta. Nestes casos, a solução tipicamente é um pico único, com posição semelhante ao pico de maior amplitude da distribuição original. Mais uma vez, vemos que α_L é um pouco acima do ideal, embora ainda proporcione uma decomposição similar à obtida com α_M .

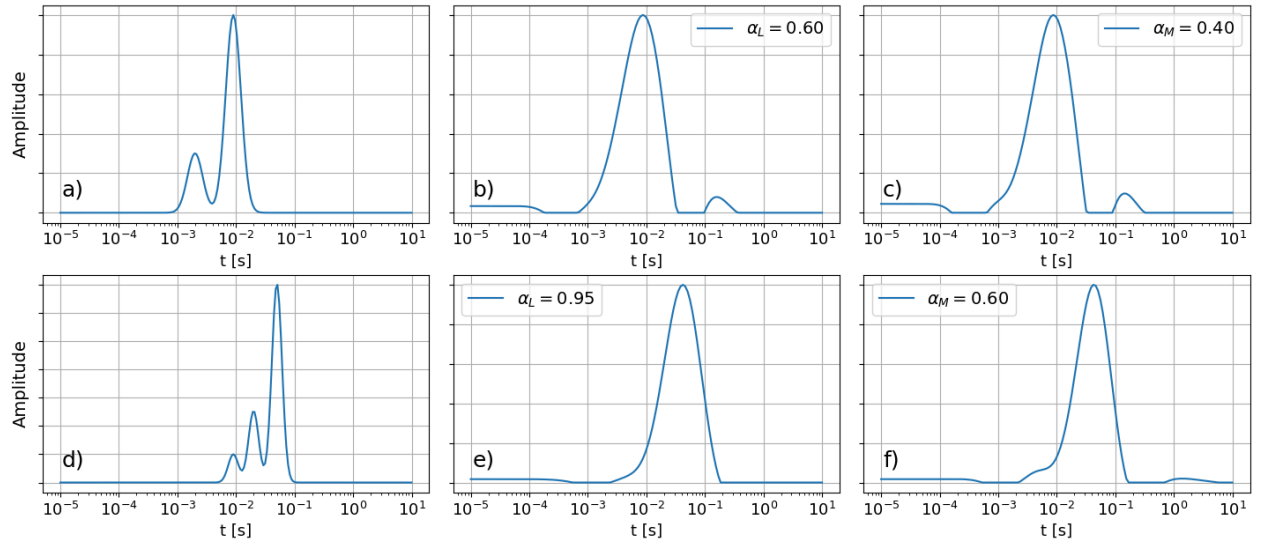


Figura 8: ILTs sobre a Família II: a) Distribuição bi-exponencial original; b) Distribuição bi-exponencial obtida com α_L ; c) Distribuição bi-exponencial obtida com α_M ; d) Distribuição tri-exponencial original; e) Distribuição tri-exponencial obtida com α_L ; f) Distribuição tri-exponencial obtida com α_M . Fonte: Elaborada pelo Autor

3.1.3 Família III

Esta família, com distribuições espaçadas e contribuições similares, se mostrou o caso mais favorável para a ILT. Como evidenciado pelas figuras (9c) e (9f), é possível recuperar os tempos de relaxação com bastante confiabilidade, uma vez escolhido um valor de α apropriado. Novamente vemos os efeitos de sobre-atenuação nas curvas da figura (9e), causado pelo valor ligeiramente elevado de α_L .

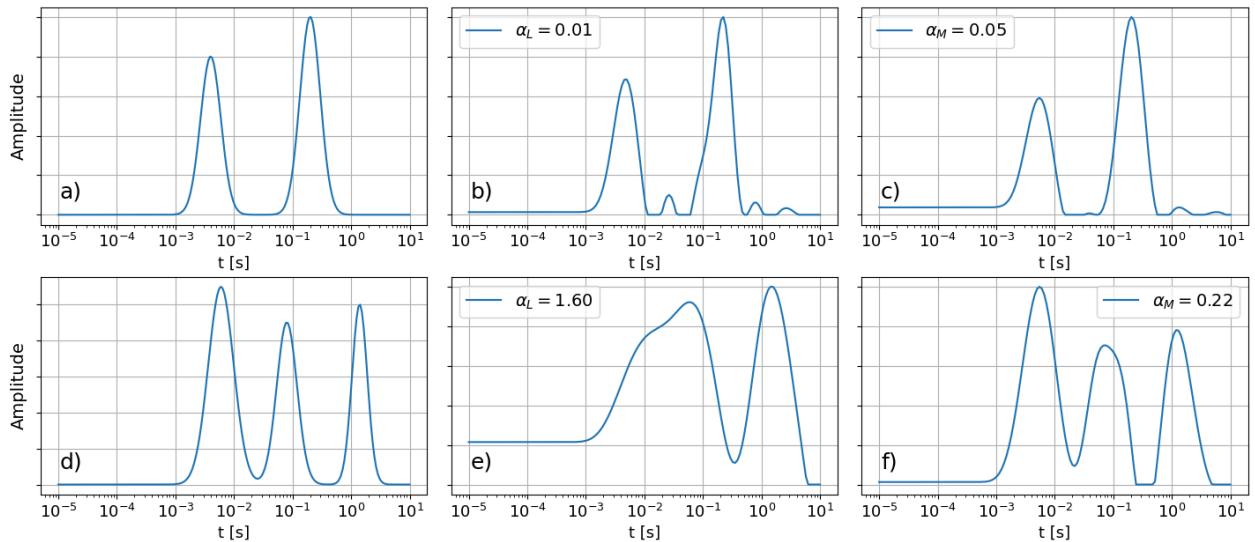


Figura 9: ILTs sobre a Família III: a) Distribuição bi-exponencial original; b) Distribuição bi-exponencial obtida com α_L ; c) Distribuição bi-exponencial obtida com α_M ; d) Distribuição tri-exponencial original; e) Distribuição tri-exponencial obtida com α_L ; f) Distribuição tri-exponencial obtida com α_M . Fonte: Elaborada pelo Autor

A curva na figura (9e) também exibe uma reta horizontal elevada em relação ao eixo x, na região de 10^{-3} até 10^{-5} . Esta reta não possui significado físico e pode ser entendido como um artefato computacional indesejado, que aparece com relativa frequência no uso da ILT. Pela natureza mal-posta do problema, é difícil apontar exatamente qual sua causa, mas ele geralmente surge quando decompomos curvas com tempos de relaxação curtos (na casa de 10^{-3} s). Este artefato costuma ser agravado por valores elevados de α , como visível ao comparar as figuras (9e) e (9f).

3.1.4 Família IV

A figura (10e) mostra novamente a reta horizontal sobre os tempos mais curtos, indicando que a ILT enfrenta dificuldades na recuperação de tempos de relaxação muito distantes ou muito curtos. Esta família apresenta problemas na sua decomposição, pois como visto na análise da família II, os picos grandes tendem a dominar a solução, dificultando a definição dos picos menores. Vemos que as soluções desta família são ruidosas, com picos indesejados se misturando aos picos de interesse, dificultando a identificação da solução.

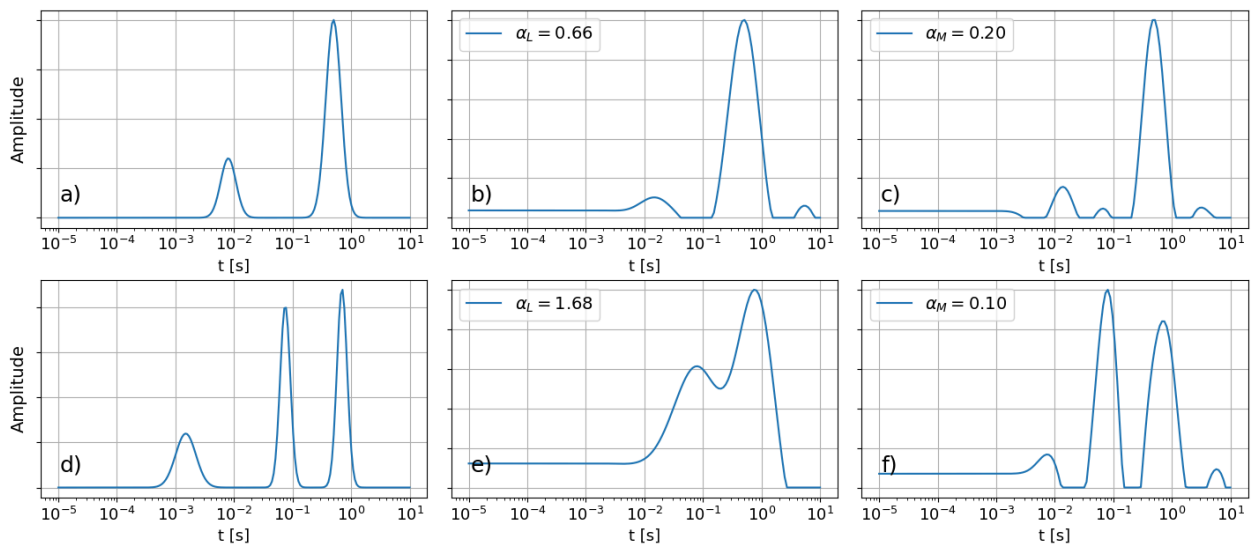


Figura 10: ILTs sobre a Família IV: a) Distribuição bi-exponencial original; b) Distribuição bi-exponencial obtida com α_L ; c) Distribuição bi-exponencial obtida com α_M ; d) Distribuição tri-exponencial original; e) Distribuição tri-exponencial obtida com α_L ; f) Distribuição tri-exponencial obtida com α_M . Fonte: Elaborada pelo Autor

3.2 Dados reais

A aplicação da ILT sobre os dados experimentais resultou na figura (11), onde cada coluna possui as distribuições de uma das amostras. Para todos os fittings, o parâmetro α foi encontrado utilizando o palpite inicial da curva-L, que foi então refinado manualmente. Para a água

desmineralizada, foram encontradas distribuições monoexponenciais com $T_1 = 3.5 \pm 0.1 \text{ s}$ e $T_2 = 1.98 \pm 0.8 \text{ s}$, visíveis na figuras (11a) e (11d) e condizentes com valores encontrados na literatura [6]. Analogamente, também foram encontradas distribuições monoexponenciais para o óleo mineral, com $T_1 = 0.15 \pm 0.04 \text{ s}$ e $T_2 = 0.16 \pm 0.3 \text{ s}$, visíveis nas figuras (11b) e (11e).

Para a amostra mista, a contribuição da água foi muito maior do que a do óleo, resultando na distribuição final similar às distribuições da água pura. Ainda assim, é possível observar componentes de baixa amplitude na região correspondente aos tempos de relaxação do óleo, tanto na distribuição de T_1 quanto na de T_2 , como mostrado nas figuras (11c) e (11f), respectivamente. Apesar dessa coincidência, a interpretação desses picos é dificultada pelo fato de apresentarem intensidades da mesma ordem de grandeza que os artefatos característicos da ILT. Neste caso, entretanto, o problema pode estar relacionado à grande diferença de amplitude entre os picos, uma condição que, como observado nos casos sintéticos, não é ideal.

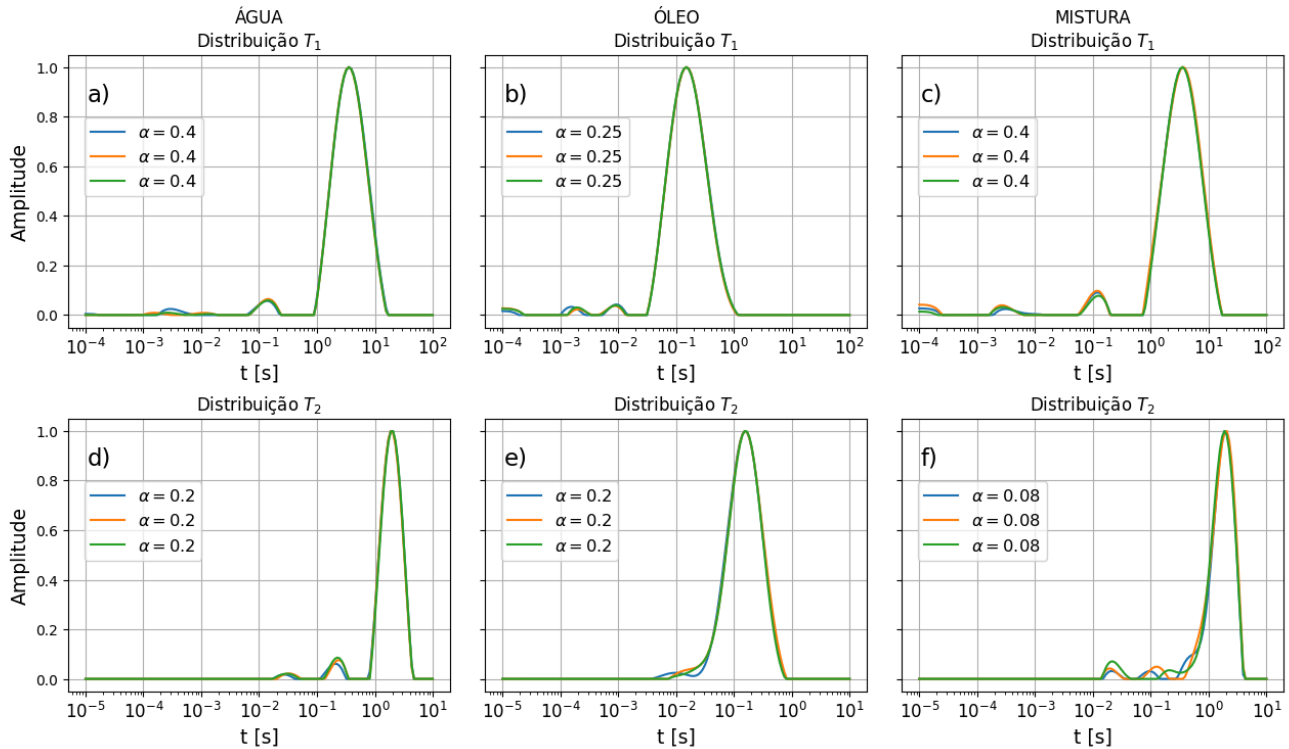


Figura 11: Distribuições de tempos de relaxação obtidas dos dados reais. a) Distribuição T_1 da água desmineralizada; b) Distribuição T_1 do óleo mineral; c) Distribuição T_1 da amostra mista de água e óleo; d) Distribuição T_2 da água desmineralizada; e) Distribuição T_2 do óleo mineral; f) Distribuição T_2 da amostra mista de água e óleo;

5 CONCLUSÕES E CONSIDERAÇÕES FINAIS

Apesar de mal-posta, a Transformada Inversa de Laplace é uma ferramenta útil para a decomposição de sinais exponenciais. Embora ela demande conhecimento por parte do operador, boa parte dos sinais adquiridos experimentalmente possuem um formato favorável para sua utilização na ILT, permitindo uma decomposição eficaz.

Os testes revelaram que a ILT apresenta dificuldade em resolver tempos de relaxação muito curtos, muito próximos e de amplitude muito distinta. Notavelmente, a aquisição de tempos de relaxação muito curtos ou muito próximos também é problemática do ponto de vista experimental, pois demanda equipamentos muito precisos e com baixos níveis de ruído. Assim, conclui-se que a ILT exibe mais falhas justamente com os casos experimentais mais desafiadores.

Ademais, foi visto que a curva-L frequentemente fornece palpites iniciais um tanto elevados para o parâmetro α , mas que ainda assim eles se encontram próximos o bastante do valor inicial para servir como um palpite inicial válido, mas que ainda precisa passar pela parcimônia do operador.

De maneira geral, os testes feitos com a ILT se mostraram eficientes para recuperação dos tempos de relaxação seguindo algumas limitações, agora conhecidas. Como perspectiva futura, pretende-se investigar mais amostras poliexponenciais de diferentes famílias para que seja possível garantir a validade da ILT diante destes dados. Além disso, pretende-se trabalhar numa versão 2D da ILT que é capaz de gerar um mapa de correlações entre os pares de tempo de relaxação de cada componente da amostra.

REFERÊNCIAS

- 1 MARASSI, A. Nuclear magnetic resonance methodologies applied for seed evaluation. 2021, Tese (Doutorado)-Universidade de São Paulo, São Carlos, Disponível em: <https://www.teses.usp.br/teses/disponiveis/76/76132/tde-08092021-104102/>. Acesso em: 31 out. 2025
- 2 SONG, Y.Q. Magnetic resonance of porous media (MRPM): A perspective. Journal of Magnetic Resonance 229,p.12-24 (2013)
- 3 MORAES, T. B. Transformada Inversa de Laplace para análise de sinais de ressonância

magnética nuclear de baixo campo, Quim. Nova, vol 44, No. 8,1020-1027 (2021)

4 DAY, I. J. On the inversion of diffusion NMR data: Tikhonov regularization and optimal choice of the regularization parameter, J. of Magnetic Resonance 211, 178-185 (2011)

5 TIKHONOV A. N., ARSENIN V.Y. Solutions of Ill-Posed Problems, John Wiley and Sons, New York, 1977.

6 MARCOLAN J. Digital Magnetic Resonance Spectrometer (DMRS) from CIERMag: calibration and relaxometry measurements methodology. 2023, Tese-(Mestrado),Universidade de São Paulo, São Carlos, Disponível em:

<https://www.teses.usp.br/teses/disponiveis/76/76135/tde-14022023-115956/>. Acesso em: 31 out. 2025.

7 MACKAY A. et al. In Vivo Visualization of Myelin Water in Brain by Magnetic Resonance. Magn Reson Med, p.673-677 (1994)

8 HANSEN P.C, O'LEARY, D.P. The use of the L-Curve in the regularization of discrete ill-posed problems. SIAM J. Sci. Comput. 14. p. 1487-1503 (1993)

9 MARTINS M. J., VIDOTO E. L. G., TANNÚS A. inventors; Universidade de São Paulo, assignee. Espectrômetro para uso em sistemas de ressonância magnética e sistemas de ressonância magnética. Brazil Patent No. BR102015000624-1. 2015.

10 PIZETTA, D. C. PyMR : um framework para programação de sistemas de ressonância magnética. 130 p. Tese (Doutorado) Disponível em:

<http://www.teses.usp.br/teses/disponiveis/76/76132/tde-06052019-103714/>. Acesso em: 31 out. 2025.