

Méthodes géométriques et numériques pour le problème de contraste par saturation en IRM.

Olivier COTS

Post-Doc INRIA Sophia Antipolis
équipe MCTAO

3 juillet 2014.





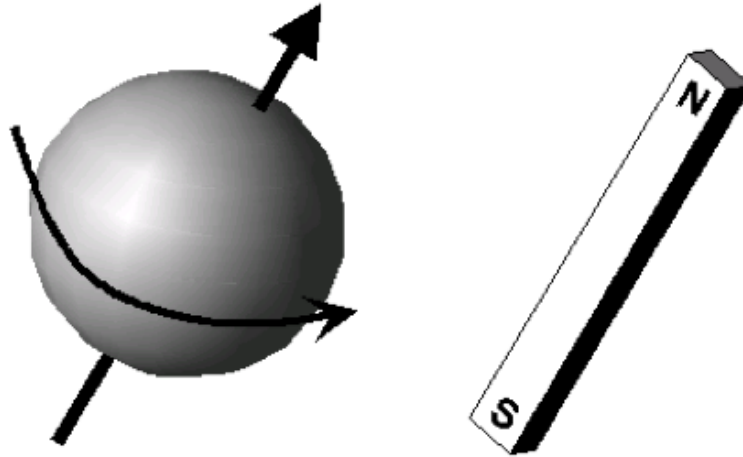
[–] B. Bonnard, M. Claeys, O. Cots & P. Martinon, *Geometric and numerical methods in the contrast imaging problem in nuclear magnetic resonance*, Acta Appl. Math., (2013), to appear.

[–] B. Bonnard, M. Claeys, O. Cots & P. Martinon, *Comparison of numerical methods in the contrast imaging problem in NMR*, proceedings of 52-nd IEEE Conference on Control Decis., Florence, Italy, (2013), to appear.

- Formulation du **problème de contraste** comme un problème de **contrôle optimal**
 - Dynamique : équation de Bloch (dynamique de l'aimantation nucléaire)
 - Coût terminal
- **Point de vue géométrique** : Principe du Maximum de Pontryagin
- **Méthodes numériques**
 - **Méthodes indirectes** (*HamPath*) : méthodes de tir, homotopique...
 - **Méthodes directes** (*Bocop*) : discrétisation états et contrôle \Rightarrow problème NLP
 - **Approche par les moments** (*GloptiPoly*) : méthode globale donnant une borne inférieure

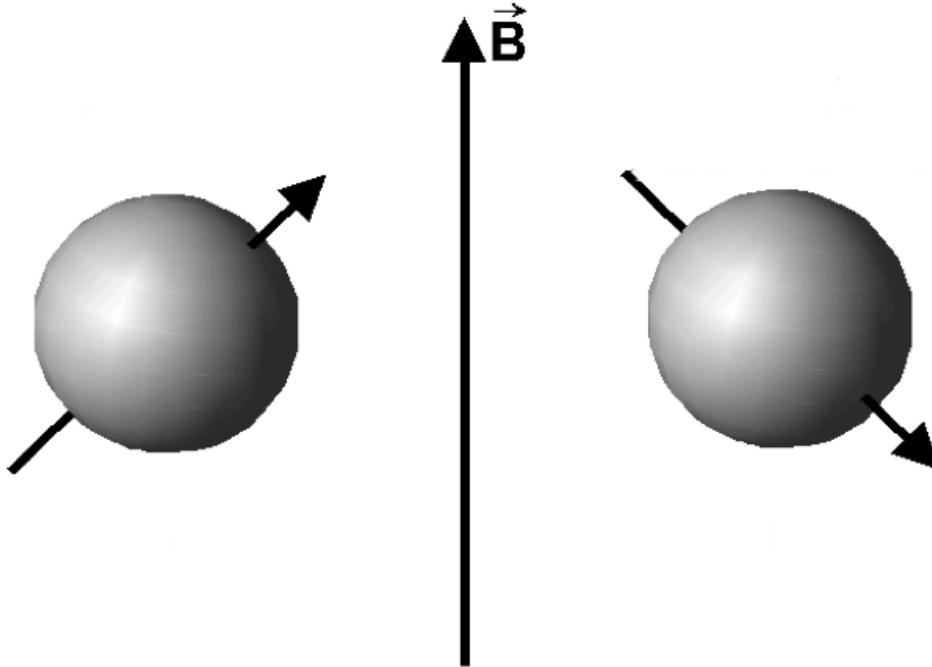
LE MOMENT MAGNÉTIQUE

Les particules de spin-1/2 (proton, neutron, electron...) possèdent un moment magnétique qui peut être assimilé à un petit aimant.

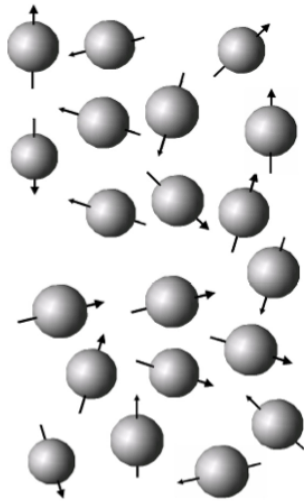


ORIENTATION DU MOMENT MAGNÉTIQUE

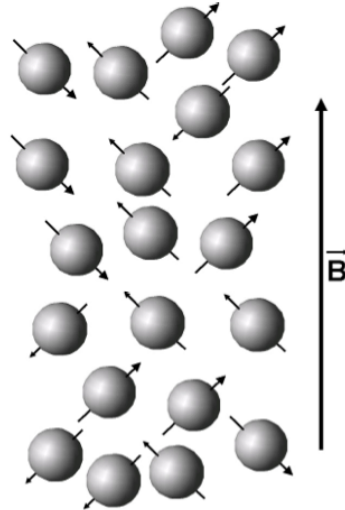
Deux orientations sont possibles pour un spin-1/2 dans un champ magnétique statique \vec{B} .



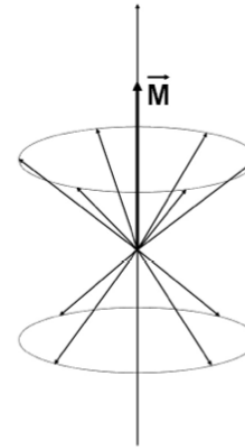
L'AIMANTATION (OU VECTEUR MAGNÉTIQUE)



(a)



(b)



(c)

(c) L'aimantation $\vec{M} = (M_x, M_y, M_z)$ est la somme vectorielle des moments magnétiques. En présence d'un champ magnétique \vec{B} , \vec{M} est non nulle et dirigée dans la direction de \vec{B} .

ÉQUATION DE BLOCH

Équation de Bloch (dynamique de l'aimantation nucléaire M).

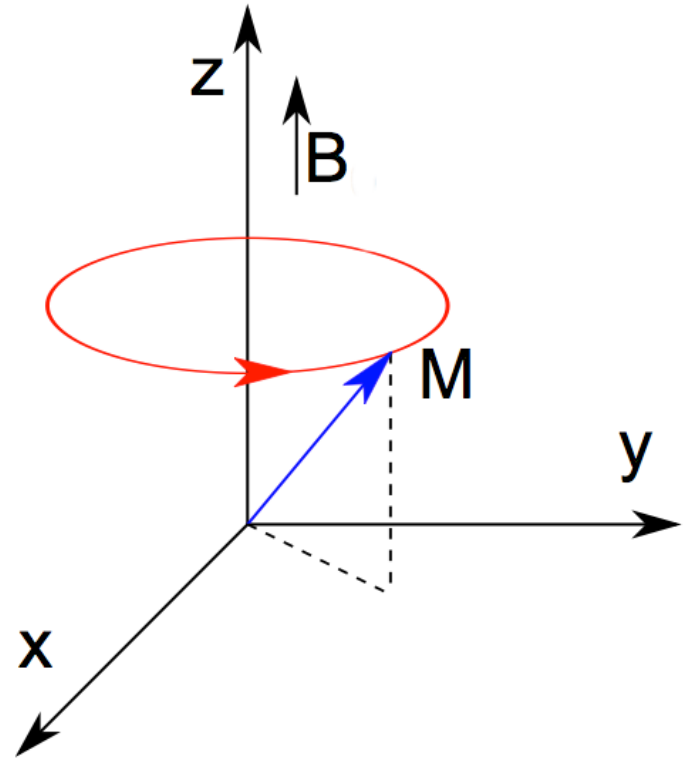
$$\frac{dM(t)}{dt} = \gamma B(t) \wedge M(t),$$

avec γ le rapport gyromagnétique.

⇒ **Précession** autour de B , à la vitesse :

$$\omega = \gamma |B|.$$

⇒ Ne change ni la norme ni le sens de M .

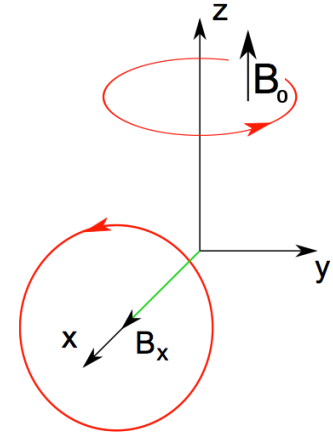


Deux champs magnétiques :

Champ statique intense : $B_0 = (0, 0, B_z)$

Champ RF de **contrôle** : $B_1(t) = (B_x(t), B_y(t), 0)$

$\Rightarrow M(t)$ est sur la sphère de rayon $M_0 := M(0)$.



Deux phénomènes de relaxation : longitudinal (T_1) et transversal (T_2)

$$\dot{M} = R(M, T_1, T_2) + \gamma B \wedge M$$

$\Rightarrow M(t)$ appartient à la boule de Bloch : $|M(t)| \leq M_0 \quad \Rightarrow \quad 2T_1 \geq T_2$.

\Rightarrow En l'absence de champ B_1 , M s'oriente le long de B_0 (retour à l'équilibre).

Équation de Bloch. $\dot{M} = R(M, T_1, T_2) + \gamma B \wedge M$

- On note $\omega_0 = -\gamma B_0$, et le contrôle $(\omega_x(t), \omega_y(t)) := -\gamma(B_x(t), B_y(t))$.

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} M_x \\ M_y \\ M_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -M_x/T_2 \\ -M_y/T_2 \\ -(M_z - M_0)/T_1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & -\omega_0 & \omega_y(t) \\ \omega_0 & 0 & -\omega_x(t) \\ -\omega_y(t) & \omega_x(t) & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} M_x \\ M_y \\ M_z \end{bmatrix}$$

Inhomogénéité sur B_0 . $\omega_0 \rightarrow \omega_0(X^m, Y^m, Z^m)$

Inhomogénéité sur B_1 . $\omega(t) := (\omega_x(t), \omega_y(t)) \rightarrow a(X^m, Y^m, Z^m)\omega(t)$

où (X^m, Y^m, Z^m) sont les coordonnées spatiales de la molécule considérée dans l'échantillon.

Référentiel tournant. Notons $\Omega_z := \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$.

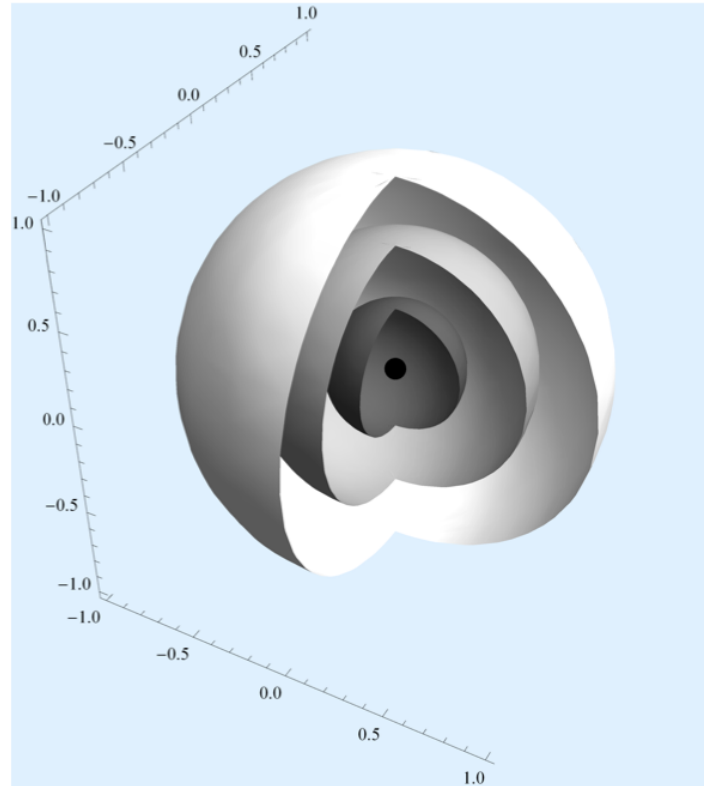
Soit $S(t) = \exp(t\omega_0\Omega_z)$ le référentiel tournant à la vitesse angulaire ω_0 autour de l'axe Oz.

Équation de Bloch, homogène et normalisée dans le référentiel tournant.

$$\begin{aligned}\dot{x} &= -\Gamma x + u_2 z \\ \dot{y} &= -\Gamma y - u_1 z \\ \dot{z} &= \gamma(1-z) + u_1 y - u_2 x\end{aligned}$$

- $q := (x, y, z) = M/M_0 \in B(0, 1)$: vecteur magnétique normalisé
- Le contrôle $u = (u_1, u_2)$ normalisé vérifie $|u| \leq 2\pi$
- γ, Γ : caractéristiques de l'échantillon. Ils vérifient $2\Gamma \geq \gamma$ et sont fonction de T_1, T_2 .
- $N := (0, 0, 1)$: point d'équilibre

En imagerie, on attribue un niveau de gris en fonction de la norme du vecteur magnétique.



PROBLÈME DE CONTRASTE PAR SATURATION EN IRM

Expérimentation : deux échantillons (sangs désoxygéné/oxygéné) placés dans deux tubes tests, l'un à l'intérieur de l'autre.

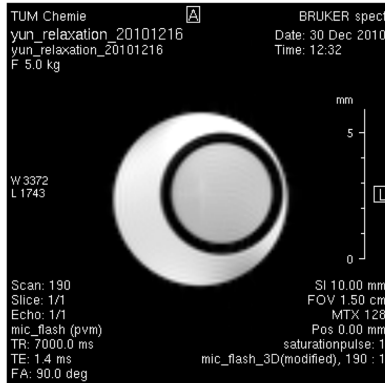


FIGURE 1 – Etat d'équilibre \Rightarrow les deux échantillons apparaissent blancs.

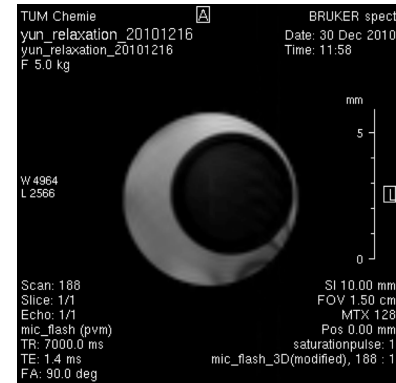


FIGURE 2 – Application du **contrôle optimal** \Rightarrow **contraste maximisé** (tube intérieur noir \equiv saturation du premier spin).

[–] E. Assémat, M. Lapert, S. J. Glaser & D. Sugny, *On the application of geometric optimal control theory to nuclear magnetic resonance*, Math. Control Relat. Fields, **3** (2013), no. 4, 375–396.

[–] B. Bonnard, O. Cots, S. J. Glaser, M. Lapert, D. Sugny & Y. Zhang, *Geometric optimal control of the contrast imaging problem in nuclear magnetic resonance*, IEEE Trans. Automat. Control, **57** (2012), no. 8, 1957–1969.

Symétrie de révolution \Rightarrow système 2D ($u_2 = 0$ et on note $u := u_1$).

– Equation de Bloch, normalisée, en dimension 2 :

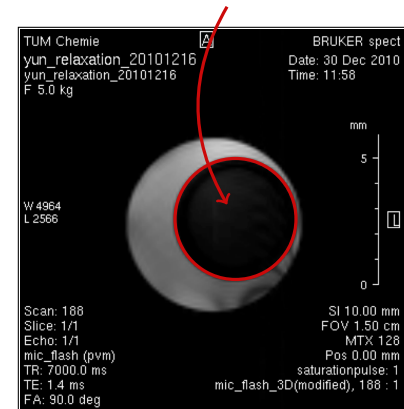
$$\begin{cases} \dot{y}(t) = -\Gamma y(t) - u(t)z(t) \\ \dot{z}(t) = \gamma(1 - z(t)) + u(t)y(t) \end{cases}$$

– γ, Γ : caractéristiques de l'échantillon ($2\Gamma \geq \gamma$).

– Contraintes : $|u| \leq 2\pi$, $|q| \leq 1$, $q = (y, z)$ (aimantation).

– Condition initiale : $q_0 := (0, 1)$. Condition terminale : $q_f := (0, 0)$.

Saturation



Définition du problème de saturation : transférer q de q_0 à q_f en temps minimum.

- **Le hamiltonien** : $H(q, p, u) = \langle p, \dot{q} \rangle = \langle p, F_0(q) + uF_1(q) \rangle = H_0 + u H_1$

- **Conditions nécessaires (PMP)** : Si u est optimal, alors $\exists p : [0, t_f] \rightarrow \mathbb{R}^n$ tq pp :

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

et

$$H(q(t), p(t), u(t)) = \max_{|v| \leq 2\pi} H(q(t), p(t), v)$$

On a alors :

$$\begin{cases} u(t) = 2\pi \operatorname{sgn} H_1 \text{ est bang} & \text{si } H_1 \neq 0 \\ u(t) \text{ est singulier} & \text{si } H_1 = 0 \end{cases}$$

EXEMPLE DANS LE CAS RÉGULIER

$$(OCP) \begin{cases} \min_{u \in \mathbb{R}} \frac{1}{2} \int_0^1 u(t)^2 dt \\ \dot{q}(t) = -q(t) + u(t), \quad q(0) = -1, \quad q(1) = 0 \end{cases}$$

- Le hamiltonien : $H(q(t), p(t), u(t)) = -\frac{1}{2}u(t)^2 + p(t)(-q(t) + u(t))$,

- Principe du maximum : $u^*(t) := u^*(q(t), p(t)) = p(t) \quad \left(\frac{\partial^2 H}{\partial u^2} = -1 < 0 \right)$,

- On remplace : $H(q, p, u^*(q, p)) = \frac{p^2}{2} - qp$.

- On obtient : $(BVP) \begin{cases} \dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} = -q + p, & \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q} = p \\ q(0) = -1 \\ q(1) = 0 \end{cases} \Rightarrow p(0) ?$

- **Le hamiltonien** : $H(q, p, u) = \langle p, \dot{q} \rangle = H_0 + u H_1 \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial^2 H}{\partial u^2} \equiv 0.$

- **Principe du maximum** : $H(q(t), p(t), u(t)) = \max_{|v| \leq 2\pi} H(q(t), p(t), v)$

$$\begin{cases} u(t) = 2\pi \operatorname{sgn} H_1 \text{ est bang} & \text{si } H_1 \neq 0 \\ u(t) \text{ est singulier} & \text{si } H_1 = 0 \end{cases}$$

\Rightarrow **Deux arcs singuliers**, $y = 0$ et $z = \gamma/2\delta$:

$$\left. \begin{array}{l} H_1 = \langle p, F_1 \rangle = 0 \\ \dot{H}_1 = \langle p, F_{10} \rangle = 0 \end{array} \right\} \Rightarrow \det(F_1, F_{10}) = y(-2\delta z + \gamma) = 0$$

avec $\delta = \gamma - \Gamma$.

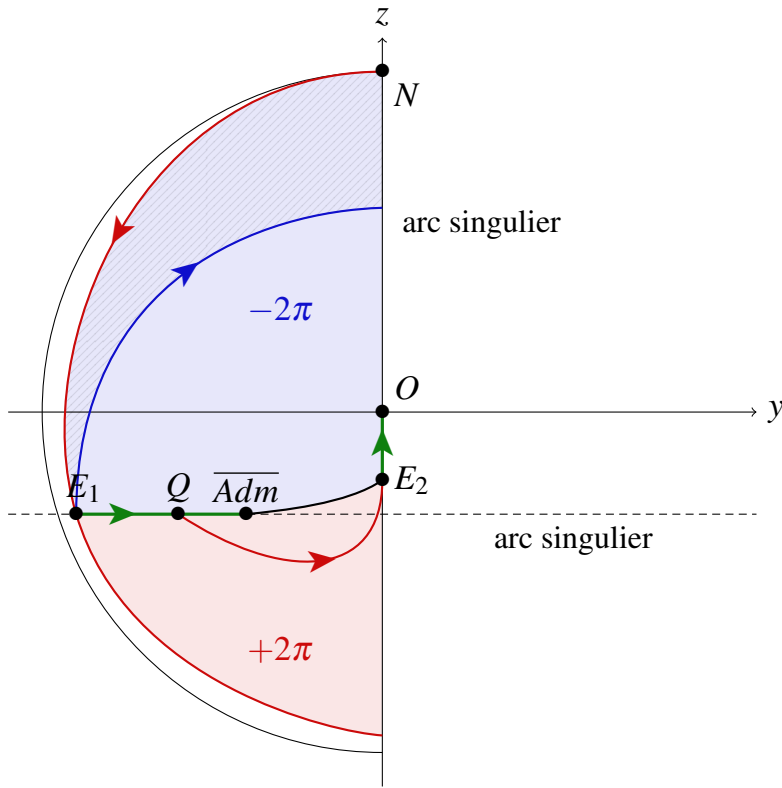


FIGURE 3 – La trajectoire optimale en temps minimal pour rejoindre le centre est NE_1QE_2O . Structure BSBS.

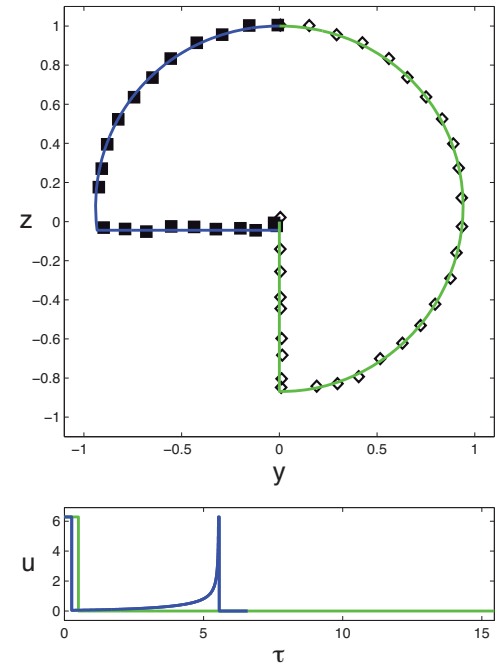


FIGURE 4 – Résultat expérimental : séquence d'inversion classique en vert, séquence optimale en bleue.

Expérimentation : deux échantillons (sangs désoxygéné/oxygéné) placés dans deux tubes tests, l'un à l'intérieur de l'autre.

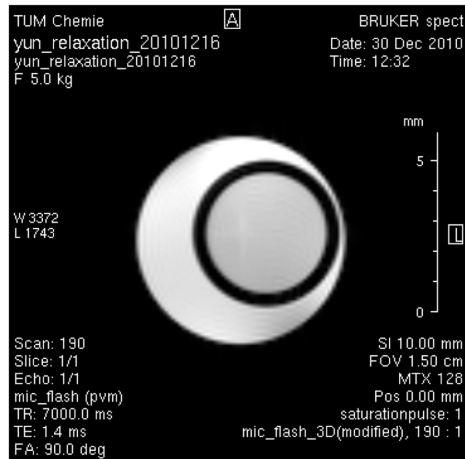


FIGURE 5 – Etat d'équilibre \Rightarrow les deux échantillons apparaissent blancs.

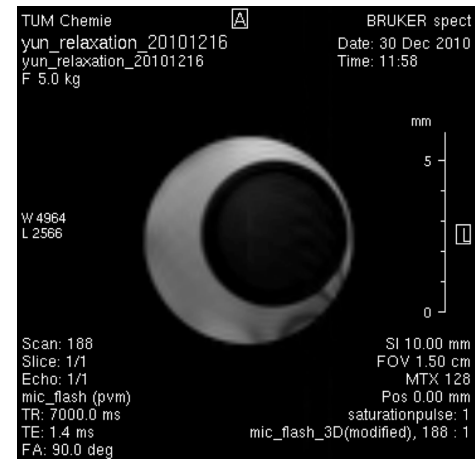
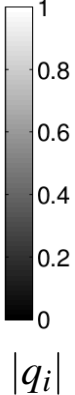


FIGURE 6 – Application du **contrôle optimal** \Rightarrow

contraste maximisé (tube intérieur noir \equiv saturation du premier spin).

PROBLÈME DE CONTRASTE BI-ENTRÉE : FORMULATION DU PROBLÈME

Deux équations de Bloch. Deux systèmes 3D **couplés** par un même contrôle $u = (u_1, u_2)$.

$$\dot{q} = F_0 + u_1 F_1 + u_2 F_2 \quad \left\{ \begin{array}{l} \dot{x}_1 = -\Gamma_1 x_1 + u_2 z_1 \\ \dot{y}_1 = -\Gamma_1 y_1 - u_1 z_1 \\ \dot{z}_1 = \gamma_1(1 - z_1) + u_1 y_1 - u_2 x_1 \\ \dot{x}_2 = -\Gamma_2 x_2 + u_2 z_2 \\ \dot{y}_2 = -\Gamma_2 y_2 - u_1 z_2 \\ \dot{z}_2 = \gamma_2(1 - z_2) + u_1 y_2 - u_2 x_2 \end{array} \right.$$


Paramètres des échantillons. $\Lambda_i := (\gamma_i, \Gamma_i)$

Espace d'états. $\mathbf{Q} = \{q = (q_1, q_2) \in \mathbb{R}^n : |q_1| \leq 1, |q_2| \leq 1\}, q_i = (x_i, y_i, z_i)$

Domaine des contrôles. $\mathbf{U} = \{u \in \mathbb{R}^2 : |u| \leq 2\pi\}$

Etat initial (pôle Nord). $q_1(0) = q_2(0) = (0, 0, 1)$

Saturation du premier spin. $q_1(t_f) = (0, 0, 0)$

Maximisation du contraste. $c(q(t_f)) := -|q_2(t_f)|^2 \rightarrow \min$

- **Le hamiltonien** : $H(q, p, u) = \langle p, \dot{q} \rangle = H_0 + u_1 H_1 + u_2 H_2, \quad H_i = \langle p, F_i(q) \rangle$.
- **Principe du maximum** : $H(q(t), p(t), u(t)) = \max_{|v| \leq 2\pi} H(q(t), p(t), v)$

$$\begin{cases} u(t) = 2\pi \frac{(H_1, H_2)}{\sqrt{H_1^2 + H_2^2}} \text{ est bang} & \text{si } \sqrt{H_1^2 + H_2^2} \neq 0 \\ u(t) \text{ est singulier} & \text{si } H_1 = H_2 = 0 \end{cases}$$

- **Définitions.** Soient F_1, F_2 deux champs de vecteurs et $z = (q, p) \in T^*\mathbf{Q}$.

$$\text{Crochet de Lie : } F_{12} := [F_1, F_2](q) = \frac{\partial F_1}{\partial q}(q)F_2(q) - \frac{\partial F_2}{\partial q}(q)F_1(q)$$

$$\text{Crochet de Poisson : } H_{12} := \{H_1, H_2\}(z) = dH_1(\vec{H}_2)(z) = H_{[F_1, F_2]}(z), \quad \vec{H}_2 = \begin{pmatrix} \nabla_p H_2 \\ -\nabla_q H_2 \end{pmatrix}.$$

Le hamiltonien : $H(q, p, u) = \langle p, \dot{q} \rangle = H_0 + u_1 H_1 + u_2 H_2$, $H_i = \langle p, F_i(q) \rangle$.

Ensemble des singulières : $\Sigma := H_1 = H_2 = 0$. En dérivant H_1, H_2 le long d'une extrémale :

$$\begin{cases} \dot{H}_1 = H_{01} - u_2 H_{12} = 0 \\ \dot{H}_2 = H_{02} + u_1 H_{12} = 0 \end{cases}$$

Stratification de Σ : $\Sigma = \Sigma_1 \cup \Sigma_2 \cup \Sigma_3$

- $\Sigma_1 := \Sigma \setminus H_{12} = 0$, $\Rightarrow u_s = \frac{(-H_{02}, H_{01})}{H_{12}}$

\Rightarrow Les singulières non saturantes dans Σ_1 sont soit **non admissibles**, soit **non optimales** puisqu'elles ne vérifient pas la condition de Goh : $H_{12} = 0$.

Le hamiltonien : $H(q, p, u) = \langle p, \dot{q} \rangle = H_0 + u_1 H_1 + u_2 H_2$, $H_i = \langle p, F_i(q) \rangle$.

Ensemble des singulières : $\Sigma := H_1 = H_2 = 0 \Rightarrow \begin{cases} \dot{H}_1 = H_{01} - u_2 H_{12} = 0 \\ \dot{H}_2 = H_{02} + u_1 H_{12} = 0 \end{cases}$

Stratification de Σ : $\Sigma = \Sigma_1 \cup \Sigma_2 \cup \Sigma_3$

- $\Sigma_2 := H_1 = H_2 = H_{12} = 0 \setminus \det A = 0$,

– On remarque : $H_1 = H_2 = H_{12} = 0 \Rightarrow H_{01} = H_{02} = 0$.

– En dérivant H_{01} , H_{02} , on obtient : $Au_s + b = 0$, avec $A = \begin{bmatrix} H_{011} & H_{012} \\ H_{021} & H_{022} \end{bmatrix}$ et $b = \begin{bmatrix} H_{010} \\ H_{020} \end{bmatrix}$.

Ensemble des singulières : $\Sigma := H_1 = H_2 = 0$

Stratification de Σ : $\Sigma = \Sigma_1 \cup \Sigma_2 \cup \Sigma_3$

• $\Sigma_3 := H_1 = H_2 = H_{12} = \det A = 0$, avec $A = \begin{bmatrix} H_{011} & H_{012} \\ H_{021} & H_{022} \end{bmatrix}$

– Dans Σ_3 :

$$I(q) = (x_1 y_2 - x_2 y_1)^4 (\delta_1 - \delta_2) (2\delta_1 z_1 - \gamma_1) (2\delta_2 z_2 - \gamma_2) \\ (2(\delta_1^2 \gamma_2 z_1 - \delta_2^2 \gamma_1 z_2) - \gamma_1 \gamma_2 (\delta_1 - \delta_2) - 2\delta_1 \delta_2 (\gamma_1 z_2 - \gamma_2 z_1)) = 0,$$

– Extrémales mono-entrées : $(x_1 y_2 - x_2 y_1) = 0$

– En imposant $u_2 = 0$, le système est restreint à :

$$\mathbf{Q} = \{q = (q_1, q_2) \in \mathbb{R}^4 : |q_1| \leq 1, |q_2| \leq 1, x_1 = x_2 = 0\}.$$

– Il reste : $H_1 = H_{01} = H_{010} + u_{1,s} H_{011} = 0$ (Condition de Legendre-Clebsch : $H_{011} < 0$).

Cas du fluide. Spin 1 (y_1, z_1) - Liquide cérebrospinal
Spin 2 (y_2, z_2) - Eau

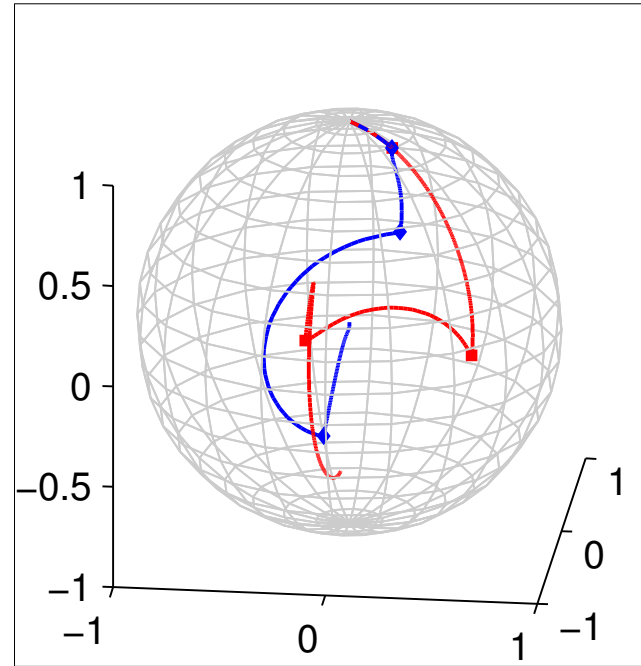
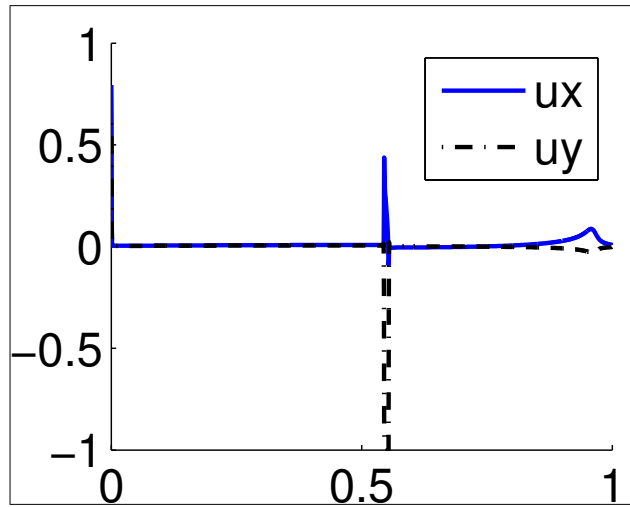


FIGURE 7 – Contrôles $u_x := u_1$ et $u_y := u_2$ pour $t_f = 2T_{\min}$ à gauche.
Trajectoire de la solution 2BS à droite : **singulières mono-entrées**.

PROBLÈME DE CONTRASTE MONO-ENTRÉE : FORMULATION DU PROBLÈME

Deux équations de Bloch. Deux systèmes 2D **couplés** par un même contrôle **scalaire**.

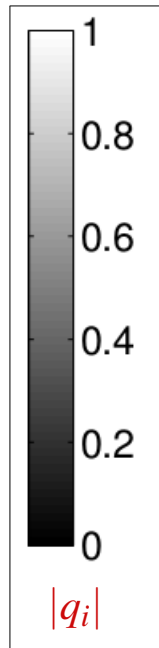
$$\dot{q} = F_0 + uF_1 \quad \begin{cases} \dot{y}_1 = -\Gamma_1 y_1 - u z_1 \\ \dot{z}_1 = \gamma_1(1 - z_1) + u y_1 \\ \dot{y}_2 = -\Gamma_2 y_2 - u z_2 \\ \dot{z}_2 = \gamma_2(1 - z_2) + u y_2 \end{cases}$$

où γ_i, Γ_i , $i = 1, 2$, sont les paramètres de chaque spin, $q_i = (y_i, z_i)$ l'état de chaque spin, vérifiant $|q_i| \leq 1$ et $|u| \leq 2\pi$ ($u := u_1$ et $u_2 = 0$).

Etat initial. $q_1(0) = q_2(0) = (0, 1)$

Saturation du premier spin. $q_1(t_f) = (0, 0)$

Maximisation du contraste. $c(q(t_f)) := -|q_2(t_f)|^2 \rightarrow \min$



- **Le hamiltonien** : $H(q, p, u) = \langle p, \dot{q} \rangle = H_0 + uH_1, \quad H_i = \langle p, F_i(q) \rangle.$

- **Principe du maximum** : $H(q(t), p(t), u(t)) = \max_{|v| \leq 2\pi} H(q(t), p(t), v)$

$$\begin{cases} u(t) = 2\pi \operatorname{sgn} H_1 \text{ est bang} & \text{si } H_1 \neq 0 \\ u(t) = -\frac{H_{010}}{H_{011}} \text{ est singulier} & \text{si } H_1 = 0 \end{cases}$$

- **Conditions terminales** : $q_1(t_f) = 0$ et $q_2(t_f) = p_2(t_f).$

Remarque : $H = H_0 + u H_1$ comme pour le problème de saturation mais le flot singulier est **bien plus complexe** (infinité d'extrémales singulières).

L'extrémale vérifiant les conditions aux extrémités la plus simple est de la forme B^+S .

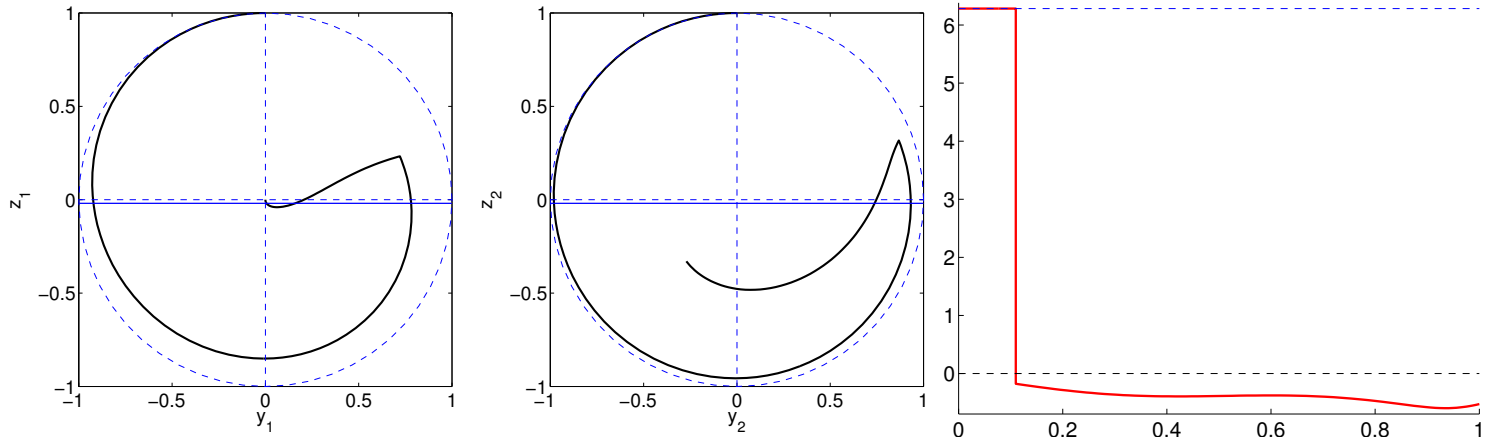


FIGURE 8 – Trajectoire des spins 1, 2 et le contrôle **bang-singulier** associé.

Résumé.

- Solutions du problèmes de contraste : séquences **Bang-Singulières**.
- On connaît T_{\min} et la solution pour le cas limite $t_f = T_{\min}$ est de la forme B^+SB^+S .

Difficultés.

- Contrôle optimal discontinu : structure complexe \Rightarrow **méthode directe, tir multiple**
- Symétries + combinatoire BS : nombreux minima locaux \Rightarrow **méthode homotopique, LMI**

Problème de contrôle optimal lisse (P_λ)

(PMP)

$$(TPBVP_\lambda) \begin{cases} \dot{z}(t) = \vec{H}(z(t), \lambda) = \left(\frac{\partial H}{\partial p}, -\frac{\partial H}{\partial q} \right), & z = (q, p) \\ E(z(0), z(t_f), \lambda) = 0 \in \mathbb{R}^{2n} \end{cases}$$

(Méthode de tir simple : $S_\lambda(z_0) = 0$)

$$S_\lambda(z_0) := E(z_0, z(t_f, z_0, \lambda), \lambda) \quad (S_\lambda : \mathbb{R}^{2n} \rightarrow \mathbb{R}^{2n})$$

où $z(\cdot, z_0, \lambda)$ est la solution de : $\dot{z}(t) = \vec{H}(z(t), \lambda)$, $z(0) = z_0$.

Méthode de Newton pour résoudre $S_\lambda(z_0) = 0 : z_{n+1} = z_n + b_n$, $S'_\lambda(z_n)b_n = -S_\lambda(z_n)$.

$$S'_\lambda(z_0) = \frac{\partial E}{\partial z_0}(z_0, z(t_f, z_0, \lambda), \lambda) + \frac{\partial E}{\partial z_f}(z_0, z(t_f, z_0, \lambda), \lambda) \frac{\partial z}{\partial z_0}(t_f, z_0, \lambda),$$

- Différentiation automatique pour $\partial_{z_0}E$ et $\partial_{z_f}E$.
- $\partial_{z_0}z$ est solution des équations variationnelles

$$\delta \dot{z}(t) = \partial_z \vec{H}(z(t), \lambda) \delta z(t), \quad \delta z(0) = I_{2n}.$$

Exemple d'une structure **BS**. On note t_0, t_1, t_f les différents instants et z_0, z_1, z_f les variables d'états et d'états adjoints associés ($z = (q_1, q_2, p_1, p_2) \in \mathbb{R}^4 \times \mathbb{R}^4$).

Equations pour le tir multiple :

$$\begin{array}{ccccc}
 & & \textit{Bang} & & \textit{Sing} \\
 (t_0, z_0) & \longrightarrow & (t_1, z_1) & \longrightarrow & (t_f, z_f) \\
 q_1 = (0, 1) & & H_1(z_1) = 0 & & q_1 = (0, 0) \\
 q_2 = (0, 1) & & \dot{H}_1(z_1) = 0 & & q_2 = p_2
 \end{array}$$

avec les conditions de raccordement $z(t_1, t_0, z_0) = z_1$.

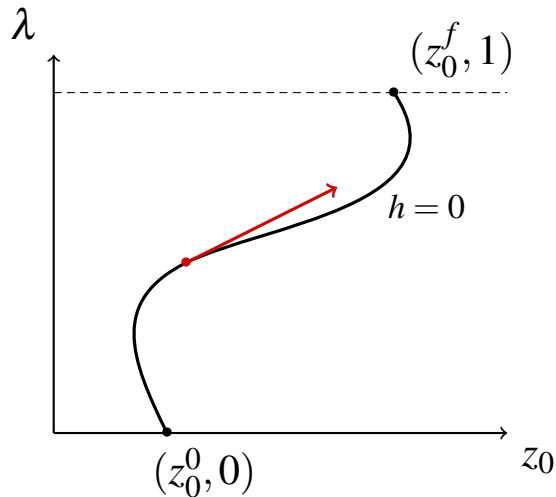
Méthode : Résoudre $S_\lambda(z_0, t_1, z_1) = 0$.

- On définit la fonction homotopique h , pour $z_0 = (q_0, p_0)$, par :

$$h : \mathbb{R}^{2n} \times [0, 1] \longrightarrow \mathbb{R}^{2n}$$

$$(z_0, \lambda) \longmapsto S_\lambda(z_0)$$

- Si 0 est une valeur régulière pour h , l'ensemble $\{h = 0\}$ est une variété de dimension un de \mathbb{R}^{2n+1} appelée le **chemin de zéros**.



\Rightarrow On résout une famille de problèmes.

On paramétrise le chemin par l'abscisse curviligne et on note $c(s) := (z_0(s), \lambda(s))$.

Calcul du vecteur tangent par méthode QR. Pour tout s , $h(c(s)) = 0$,

$$\Rightarrow h'(c(s))\dot{c}(s) = 0$$

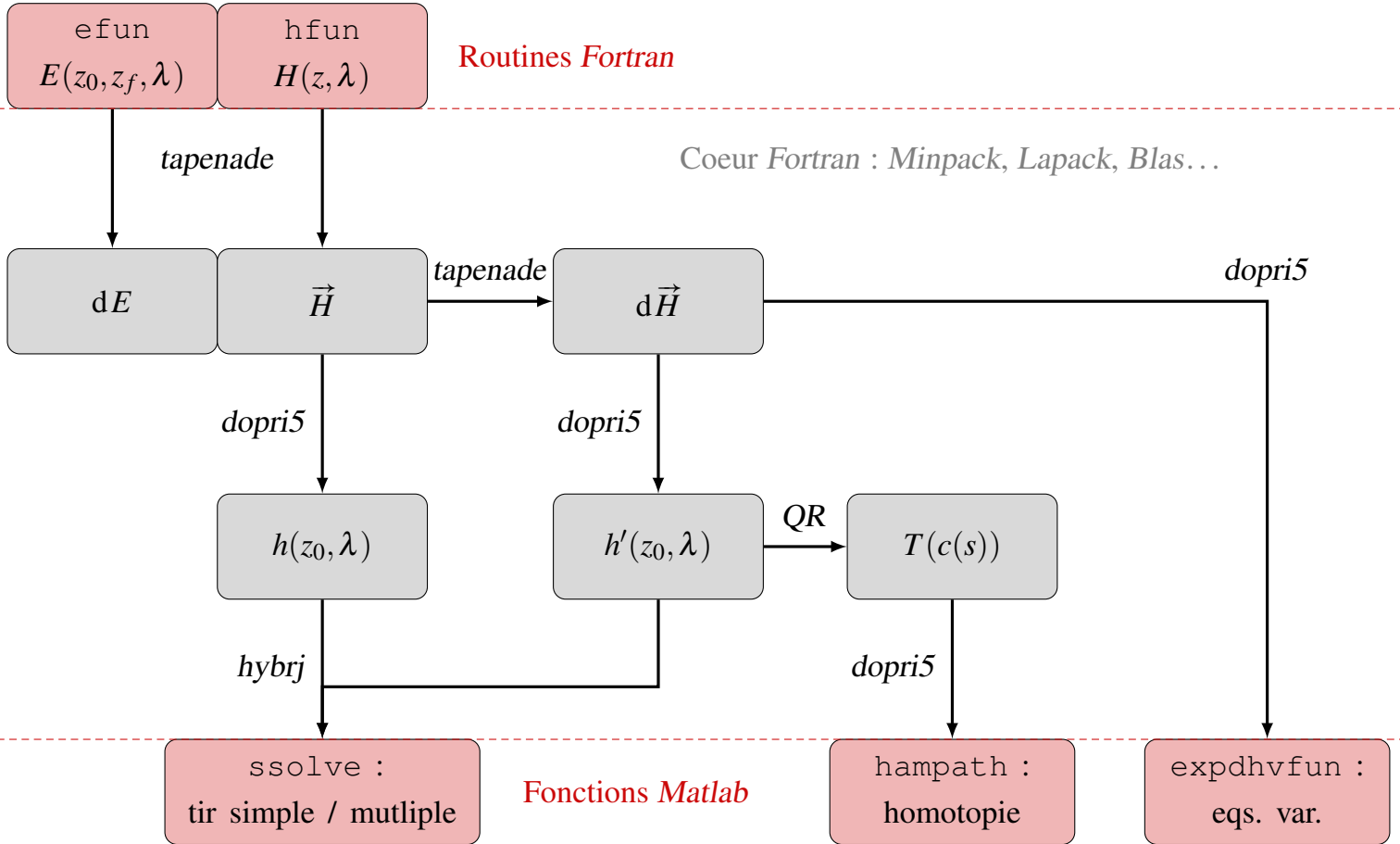
et puisque $c(s)$ est un point régulier,

$$\dim \ker h'(c(s)) = 1.$$

Intégration numérique. Intégrateur à pas variable de type RK(4)5 pour intégrer :

$$\begin{cases} \dot{c}(s) = T(c(s)) \\ c(0) = (z_0^0, 0) \end{cases}$$

On intègre jusqu'à s_f tel que $\lambda(s_f)$ soit suffisamment proche de 1 (sortie dense).



Approche 1 : Régulariser le problème de Mayer en un problème de **Bolza** :

$$\min_{u(\cdot)} c(q(t_f)) + (1 - \lambda) \int_0^{t_f} |u(t)|^{2-\lambda} dt, \quad \lambda \in [0, 1]$$

λ : paramètre homotopique.

- $\lambda < 1$: problème régularisé
- $\lambda = 0$: résolution par tir simple.
- Homotopie sur $\lambda : 0 \rightarrow \lambda_f$, proche de 1...
- ... pour capturer la structure + tir multiple (en $\lambda = 1$).

[–] B. Bonnard & O. Cots, *Geometric numerical methods and results in the control imaging problem in nuclear magnetic resonance*, Math. Models Methods Appl. Sci., **24** (2014), no. 1, 187–212.

[–] O. Cots, *Contrôle optimal géométrique : méthodes homotopiques et applications*. Phd thesis, Institut Mathématiques de Bourgogne, Dijon, France, 2012.

Approche 2 : On utilise les méthodes directes (*Bocop*) pour initialiser la méthode de tir multiple.

Principes des méthodes directes. Discrétisation \Rightarrow problème d'opti non linéaire en dim finie.

- Direct (*Bocop*^a) : force brute, grand rayon de convergence.
- Indirect (*HamPath*) : grande précision, information riche de l'homotopie (sensibilité par rapport à t_f).

[–] B. Bonnard, M. Claeys, O. Cots & P. Martinon, *Geometric and numerical methods in the contrast imaging problem in nuclear magnetic resonance*, Acta Appl. Math., (2013), to appear.

a. <http://bocop.org>

[–] F. J. Bonnans, P. Martinon & V. Grélard. *Bocop - A collection of examples*, Technical report, INRIA, 2012.

- Seule information utilisée : T_{\min} pour fixer le temps final dans $[1, 3]T_{\min}$.
- Les variables d'états et de contrôle sont initialisées comme des fonctions constantes.
- Chaque optimisation (*i.e.* pour chaque $t_f = \lambda T_{\min}$) utilise la **même initialisation**.
- Intégrateurs d'ordre 4 (Gauss) et 6 (Lobatto), de 500 à 1000 pas de discrétisation.

MÉTHODES DIRECTES (*Bocop*) : DEUX EXEMPLES DE TRAJECTOIRES

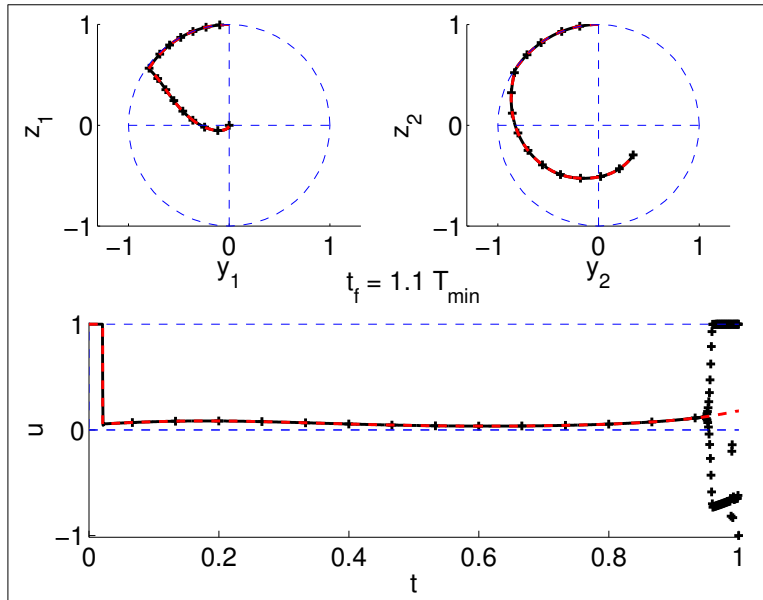


FIGURE 9 – *Bocop* et *HamPath* : Singulière mal approchée.

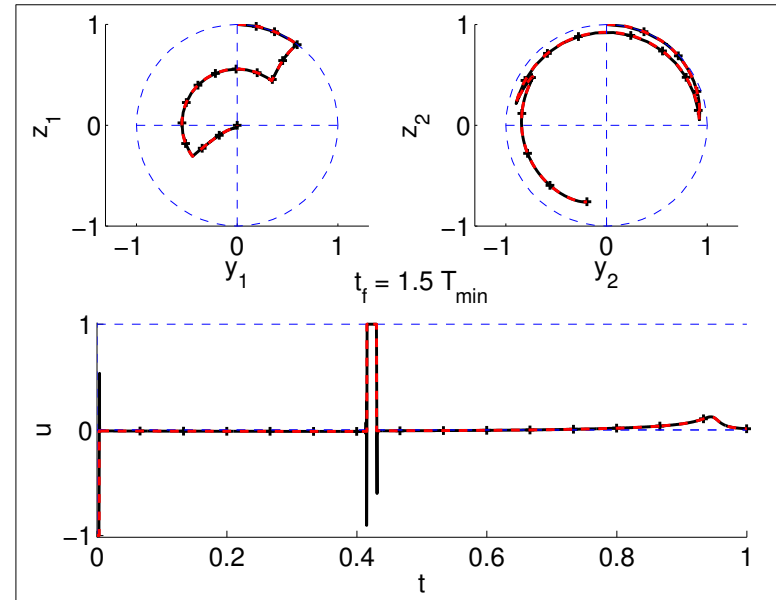


FIGURE 10 – *Bocop* et *HamPath* : Extrémités des arcs mal approchées.

Cas du fluide. Spin 1 (y_1, z_1) - Liquide cérebrospinal
 Spin 2 (y_2, z_2) - Eau

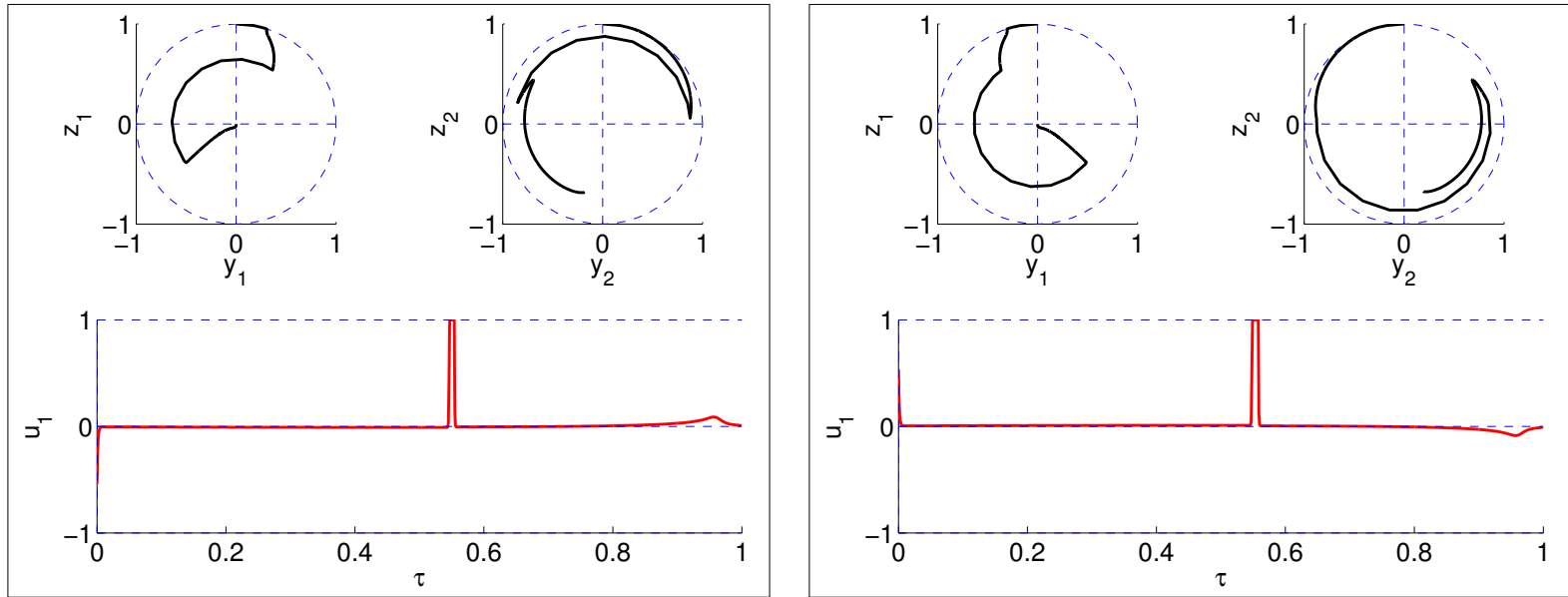


FIGURE 11 – Cas du fluide, $t_f = 2.0T_{\min}$. Le contraste est de 0.705 pour la solution $\delta_- \delta_s \delta_+ \delta_s$ et 0.702 pour la solution $\delta_+ \delta_s \delta_+ \delta_s$.

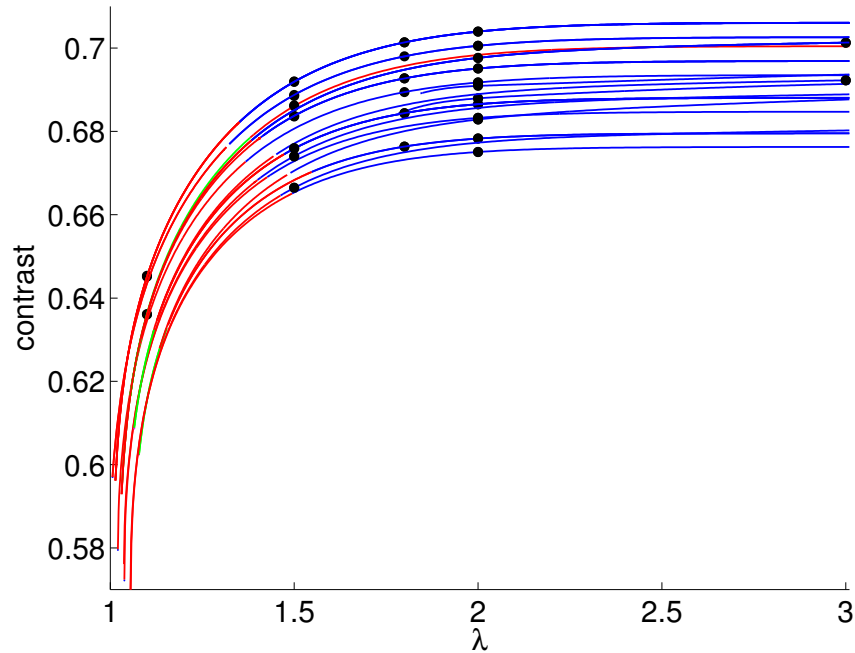
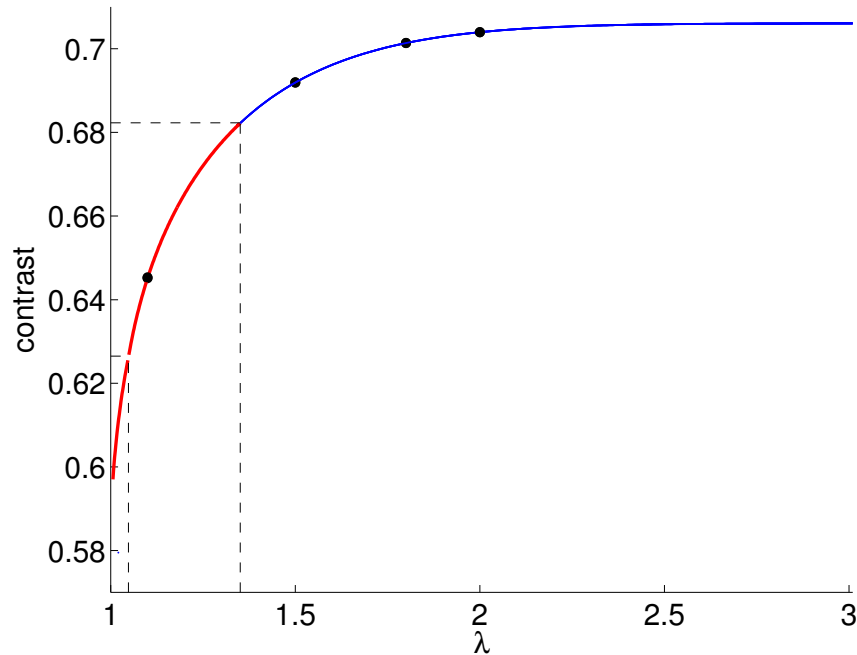


FIGURE 12 – Contraste en fonction de $\lambda = t_f/T_{\min}$ entre 1 et 3.
Structures des solutions : 4BS (vert), 3BS (rouge), 2BS (bleu).

SYNTHÈSE SOUS OPTIMALE : CAS DU FLUIDE



$\delta_+ \delta_s \delta_+ \delta_s$ pour $\lambda \in [1.000, 1.006]$ } local
 $\delta_+ \delta_s \delta_+ \delta_s \delta_- \delta_s$ pour $\lambda \in [1.006, 1.048]$ } local
 $\delta_+ \delta_s \delta_- \delta_s \delta_- \delta_s$ pour $\lambda \in [1.048, 1.351]$ } global
 $\delta_+ \delta_s \delta_- \delta_s$ pour $\lambda \in [1.351, 3.000]$ } local

Problème d'optimisation non linéaire en dimension finie ou infinie. Coût : J_{OCP} .

Problème d'optimisation linéaire sur les mesures. Coût : J_{LP} .

a)

Problème d'optimisation SDP sur les moments dénombrables. Coût : J_{SDP} .

b)

Problème d'inégalité matricielle linéaire en dimension finie. Coût : J_{LMI}^d .

Proposition (Convergence monotone.)

$$J_{\text{LMI}}^d \uparrow J_{\text{SDP}} = J_{\text{LP}} = J_{\text{OCP}}, \quad d \rightarrow \infty$$

• a) Coût et dynamique **polynomiaux** en l'état et le contrôle : mesures \Rightarrow moments.

• b) On tronque le nombre de moments jusqu'à l'ordre d pour le problème LMI.

-
- J. B. Lasserre, *Positive polynomials and their applications*, Imperial College Press, London, 2009.
 - J. B. Lasserre, D. Henrion, C. Prieur & E. Trélat, *Nonlinear optimal control via occupation measures and LMI-relaxations*, *SIAM J. Control Optim.*, **47**, (2008), no. 4, 1643-1666.

TABLE 1 – *LMI* : borne supérieure sur le contraste $\sqrt{-J_{\text{LMI}}^d}$ et temps de calcul en fonction de l'ordre de relaxation d .

d	$\sqrt{-J_{\text{LMI}}^d}$	temps CPU (s)
1	0.8474	0.7
2	0.7552	3
3	0.6226	14
4	0.6069	332
5	0.6040	8400 \approx 2h20

Approche par les moments (LMI^a) : donne une borne supérieure du contraste.

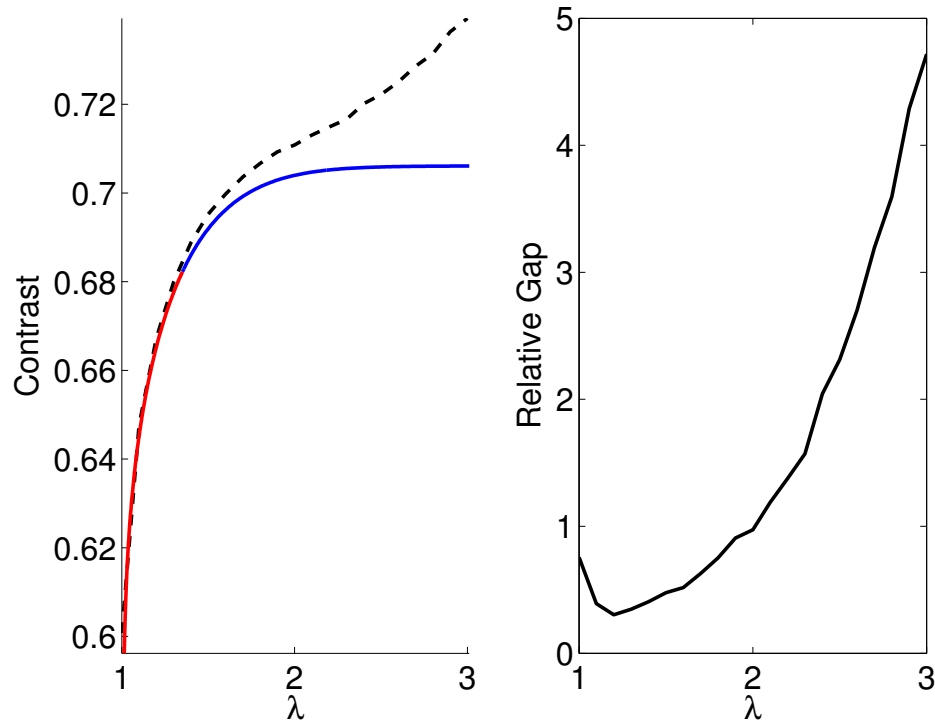


FIGURE 13 – Bornes supérieures (tirets, LMI) comparées à la synthèse (trait plein, *Ham-Path*).

^a. <http://homepages.laas.fr/henrion/software/gloptipoly3/>

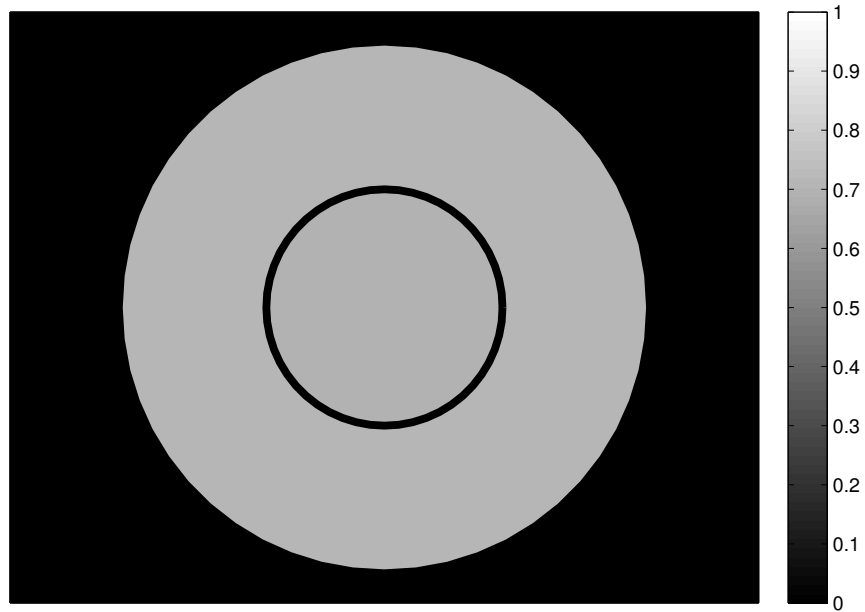


FIGURE 14 – Exemple visuel d'écart relatif de 2% pour le cas du fluide. Les normes des vecteurs magnétiques des spins des cercles intérieur et extérieur valent resp. 0.7 et 0.714.

- Problème de contraste : **beaucoup de minima locaux** + **séquences** Bang-Singulières **complexes**. La comparaison avec les méthodes directes et les techniques LMI permet de faire un grand pas vers **l'optimalité globale** et permet de valider les résultats obtenus avec *HamPath*.
- Le **problème bi-entrée** (en deux fois 3 dimensions) contient le mono-entrée (étudié ici). Est-il meilleur ?
- Tenir compte des **inhomogénéités** pour traiter le problème pratique à N (environ 50) paires d'équations de Bloch.

- [–] N. Khaneja, T. Reiss, C. Kehlet, T. Schulte-Herbrüggen & S. J. Glaser, *Optimal control of coupled spin dynamics : design of NMR pulse sequences by gradient ascent algorithms*, J. of Magn. Reson., **172** (2005), 296–305.
- [–] B. Bonnard, O. Cots, S. J. Glaser, M. Lapert, D. Sugny & Y. Zhang, *Geometric optimal control of the contrast imaging problem in nuclear magnetic resonance*, IEEE Trans. Automat. Control, **57** (2012), no 8, 1957–1969.
- [–] B. Bonnard & O. Cots, *Geometric numerical methods and results in the control imaging problem in nuclear magnetic resonance*, Math. Models Methods Appl. Sci., **24** (2014), no. 1, 187–212.
- [–] B. Bonnard, M. Claeys, O. Cots & P. Martinon, *Complementarities of indirect, direct and moment methods in the contrast imaging problem in NMR*, proceedings of 52-nd IEEE Conference on Control Decis., Florence, Italy, (2013), to appear.
- [–] B. Bonnard, M. Claeys, O. Cots & P. Martinon, *Geometric and numerical methods in the contrast imaging problem in nuclear magnetic resonance*, Acta Appl. Math., (2013), to appear.