

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

Conférence SMAI-MODE 2014

**Olivier COTS**

Post-Doc INRIA Sophia Antipolis  
équipe MCTAO



**Rennes, le 28 mars 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).

- 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

# ÉQUATION DE BLOCH

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

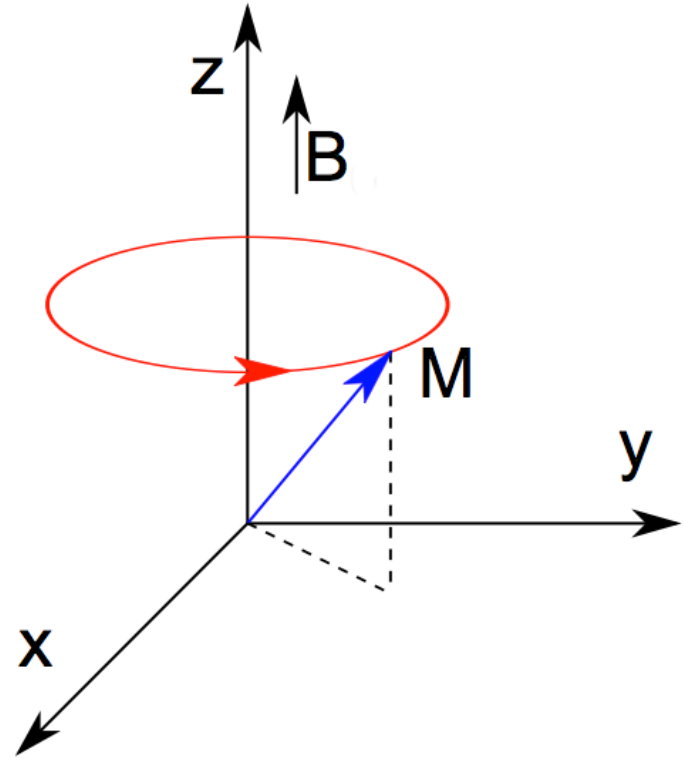
$$\frac{dM(t)}{dt} = \gamma B(t) \wedge M(t),$$

où  $\gamma$  est le rapport gyromagnétique de la particule considérée.

⇒ Mouvement de **précession** autour de  $B$ , à la vitesse angulaire :

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

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

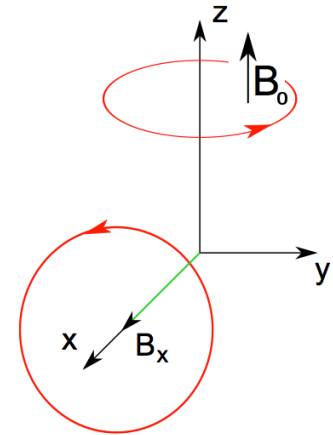


RMN : deux champs magnétiques :

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

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

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

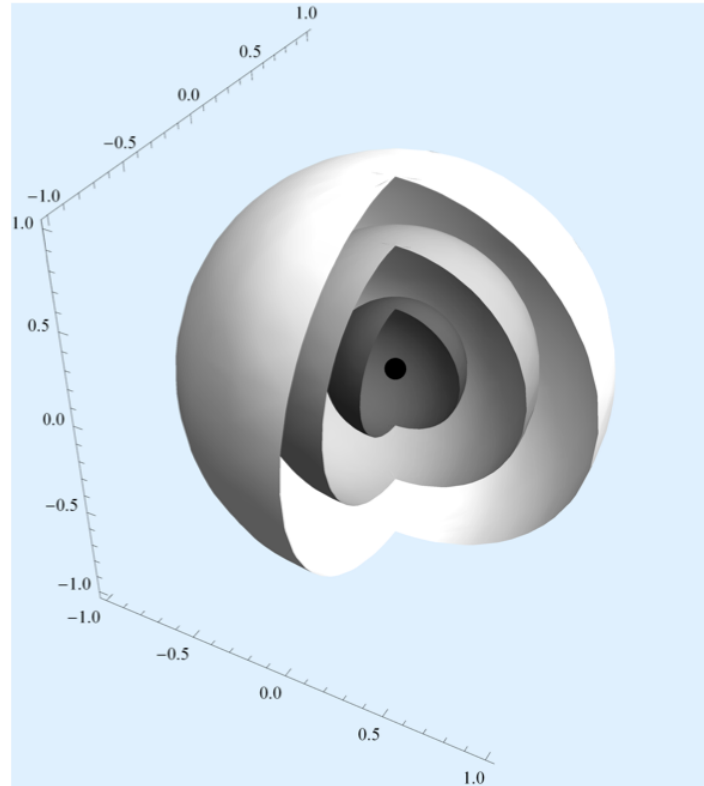


RMN : deux phénomènes de dissipation :  $\dot{M} = R(M, \gamma, \Gamma) + \gamma B \wedge M$

$\Rightarrow M(t)$  appartient à la boule de Bloch :  $|M(t)| \leq M_0$ .

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

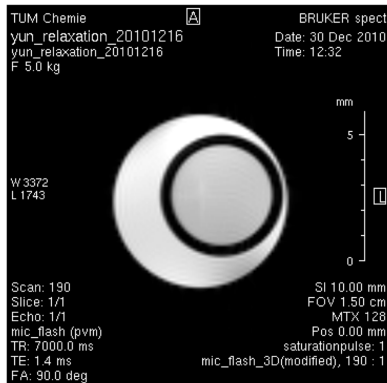


Figure 1: Etat d'équilibre  $\Rightarrow$  les deux échantillons apparaissent blancs.

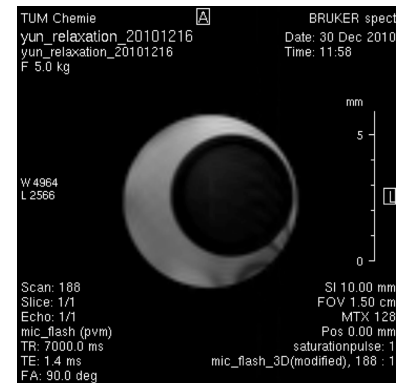


Figure 2: Application du **contrôle optimal**  $\Rightarrow$  contraste maximisé (tube intérieur noir  $\equiv$  saturation du premier spin).

---

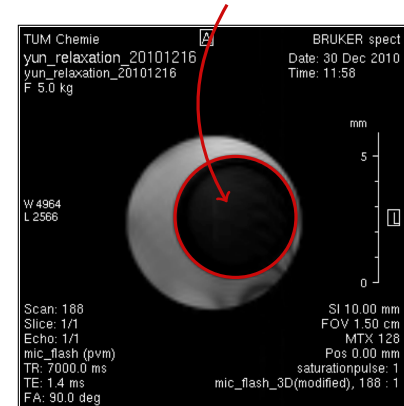
[–] E. Assémat, M. Lapert, S. J. Glaser & D. Sugny, *On the application of geometric optimal control theory to nuclear magnetic resonance*, *Math. Control Relat. Fields*, **3** (2013), no. 4, 375–396.

[–] 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.

## Saturation

– Equation de Bloch, normalisée, en dimension 2 :

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



–  $\gamma, \Gamma$  : 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 :  $q_f := (0, 0)$ .

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



# PROBLÈME DE SATURATION 2/3 : PRINCIPE DU MAXIMUM DE PONTRYAGIN

- **Le hamiltonien** :  $H(q, p, u) = \langle p, \dot{q} \rangle = \langle p, F(q) + uG(q) \rangle$ ,  $q \in \mathbb{R}^n$ ,  $p \in \mathbb{R}^n$ ,  $|u| \leq 2\pi$ .
- **Conditions nécessaires d'optimalité** : Si  $(q(\cdot), u(\cdot))$  est optimal sur  $[0, t_f]$ , alors  $\exists p : [0, t_f] \rightarrow \mathbb{R}^n$  absolument continue telle que pour presque tout  $t \in [0, t_f]$

$$\begin{cases} \dot{q}(t) &= \frac{\partial H}{\partial p}(q(t), p(t), u(t)) \\ \dot{p}(t) &= -\frac{\partial H}{\partial q}(q(t), p(t), u(t)) \\ H(q(t), p(t), u(t)) &= \max_{|v| \leq 2\pi} H(q(t), p(t), v) \end{cases}$$

$\Rightarrow$  Deux types d'arcs forment la solution optimale :

$$\begin{cases} u(t) = 2\pi \operatorname{sgn} \langle p(t), G(q(t)) \rangle \text{ est bang} & \text{si } \langle p(t), G(q(t)) \rangle \neq 0 \\ u(t) \text{ est singulier} & \text{si } \langle p(t), G(q(t)) \rangle = 0 \end{cases}$$

$\Rightarrow$  Deux arcs singuliers, un horizontal et un vertical obtenu à partir de  $\langle p(t), G(q(t)) \rangle = 0$  :

$$\left. \begin{aligned} H_G &= \langle p, G \rangle = 0 \\ \dot{H}_G &= \langle p, [G, F] \rangle = 0 \end{aligned} \right\} \Rightarrow \det(G, [G, F]) = y(-2\delta z + \gamma) = 0$$

avec  $\delta = \gamma - \Gamma$ .  $[\cdot, \cdot]$  est le crochet de Lie usuel.

# PROBLÈME DE SATURATION 3/3 : SYNTHÈSE OPTIMALE

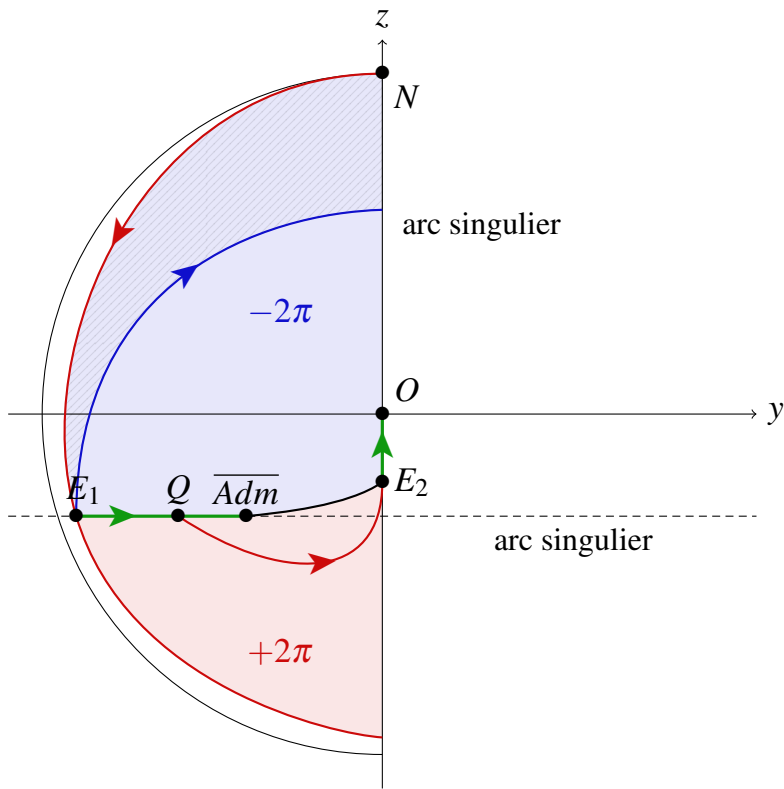


Figure 3: La trajectoire optimale en temps minimal pour rejoindre le centre est  $NE_1QE_2O$ . Structure BSBS.

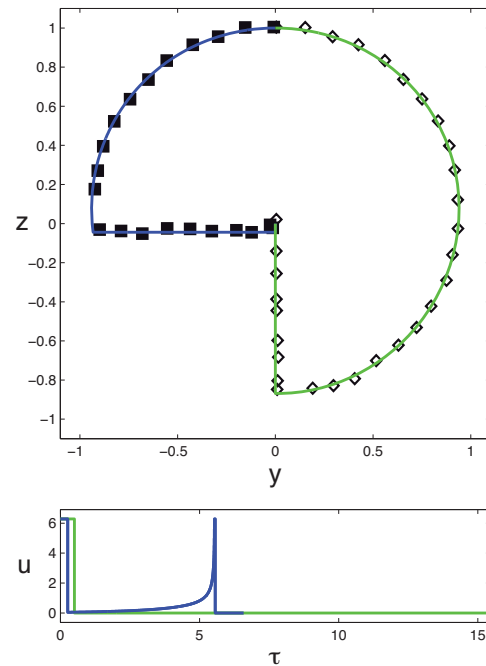


Figure 4: Résultat expérimental : séquence d'inversion classique en vert, séquence optimale en bleue.

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

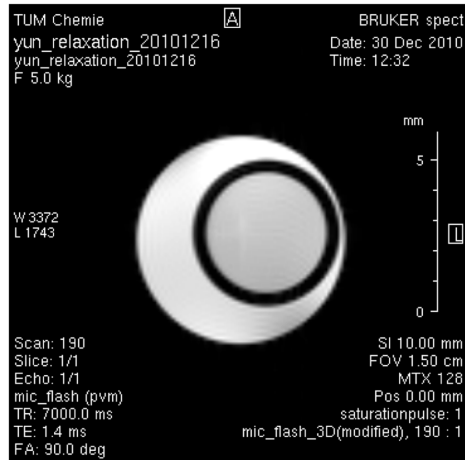


Figure 5: Etat d'équilibre  $\Rightarrow$  les deux échantillons apparaissent blancs.

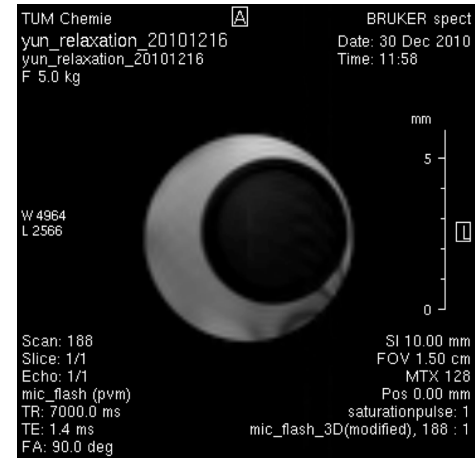


Figure 6: Application du **contrôle optimal**  $\Rightarrow$  contraste maximisé (tube intérieur noir  $\equiv$  saturation du premier spin).

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

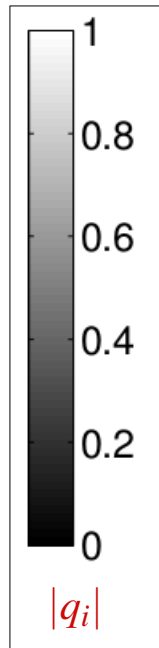
$$\begin{cases} \dot{y}_1 = -\Gamma_1 y_1 - u z_1 \\ \dot{z}_1 = \gamma_1(1 - z_1) + u y_1 \\ \dot{y}_2 = -\Gamma_2 y_2 - u z_2 \\ \dot{z}_2 = \gamma_2(1 - z_2) + u y_2 \end{cases}$$

où  $\gamma_i, \Gamma_i$ ,  $i = 1, 2$ , sont les paramètres de chaque spin,  $q_i = (y_i, z_i)$  l'état de chaque spin, vérifiant  $|q_i| \leq 1$  et  $|u| \leq 2\pi$ .

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

**Saturation du premier spin.**  $q_1(t_f) = (0, 0)$ ,  $t_f \geq T_{\min}$  fixé

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



On a un problème de type Mayer : 
$$\begin{cases} \min_{u \in \mathbf{U}} c(q(t_f)) \\ \dot{q} = F(q) + uG(q), \quad q = (q_1, q_2) \in \mathbb{R}^4 \end{cases}$$

• Hamiltonien :  $H(z, u) = H_F(z) + u H_G(z), \quad \begin{cases} z := (q, p) \\ H_F(z) := \langle p, F(q) \rangle \\ H_G(z) := \langle p, G(q) \rangle \end{cases}$

• Condition de maximisation :  $\begin{cases} u(t) = 2\pi \operatorname{sgn}(H_G(z(t))) \text{ est bang} & \text{si } H_G(z(t)) \neq 0 \\ u(t) \text{ est singulier} & \text{si } H_G(z(t)) = 0 \end{cases}$

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

**Remarque :**  $H(z, u) = H_F(z) + u H_G(z)$  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  $B^+S$ .

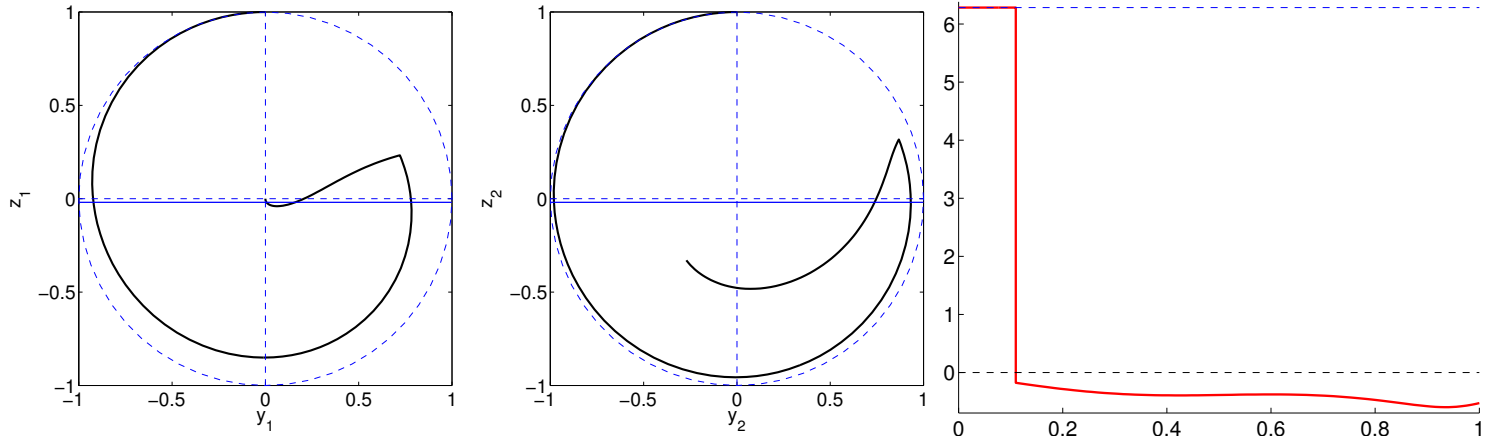


Figure 7: Trajectoire des spins 1, 2 et le contrôle **bang-singulier** associé.

## 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 ( $P_\lambda$ )

(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 :  $\dot{z}(t) = \vec{H}(z(t), \lambda)$ ,  $z(0) = z_0$ .



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 :

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

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

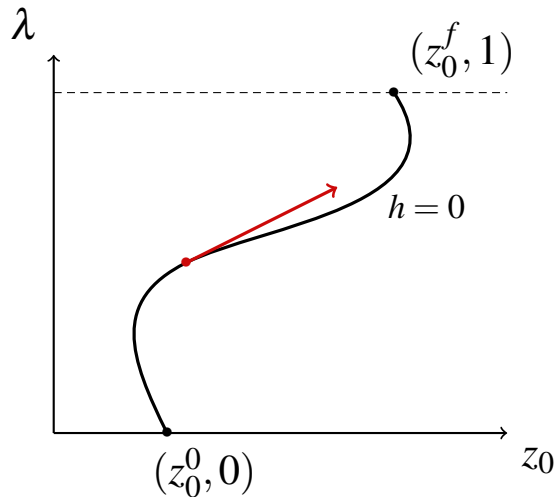
**Méthode** : Résoudre  $S_\lambda(z_0, t_1, z_1) = 0$ .

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

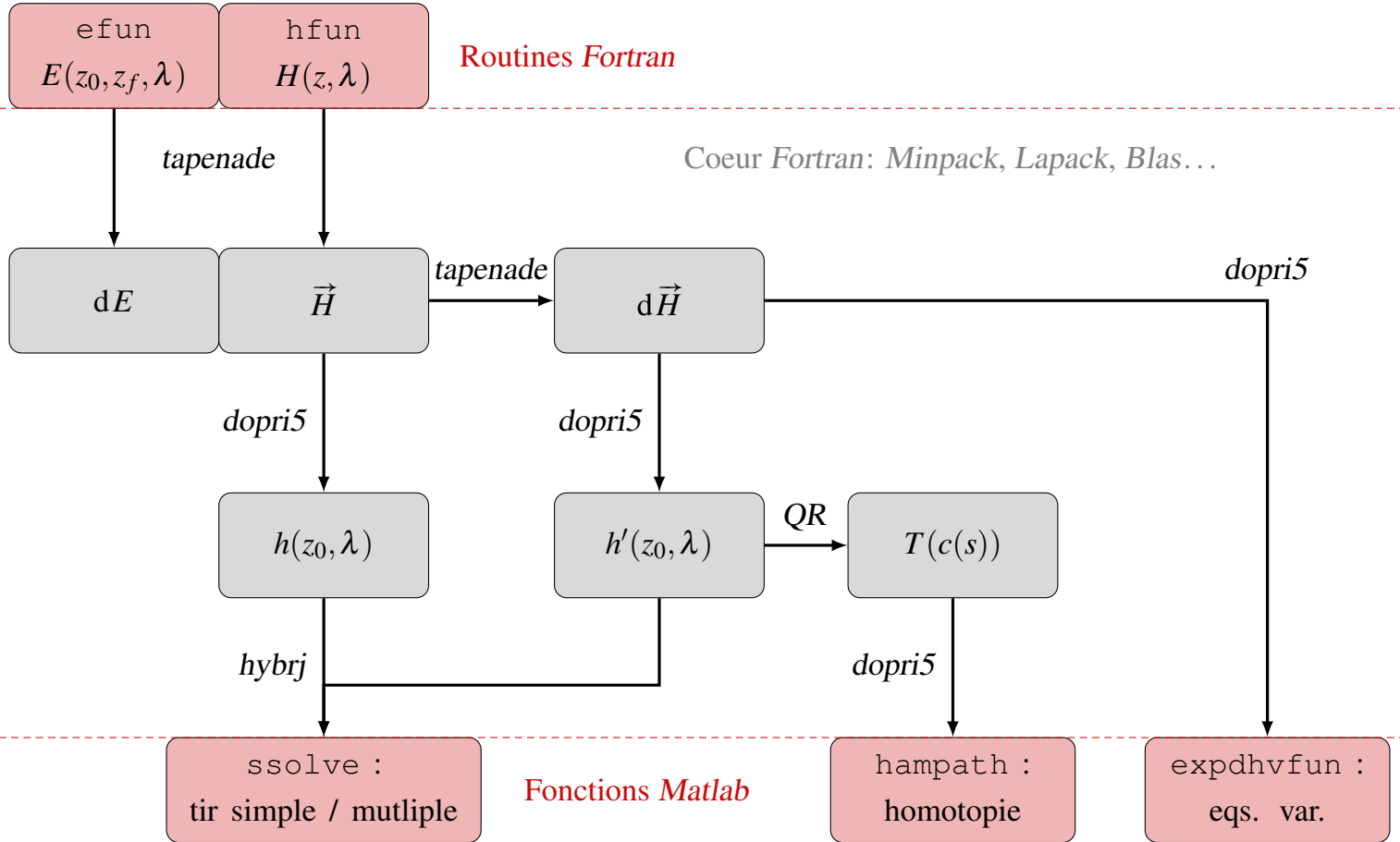
$$h : \mathbb{R}^{2n} \times [0, 1] \longrightarrow \mathbb{R}^{2n}$$

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

- 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.



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

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

$\lambda$  : 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*<sup>a</sup>) : 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.

---

<sup>a</sup> <http://bocop.org>

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

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

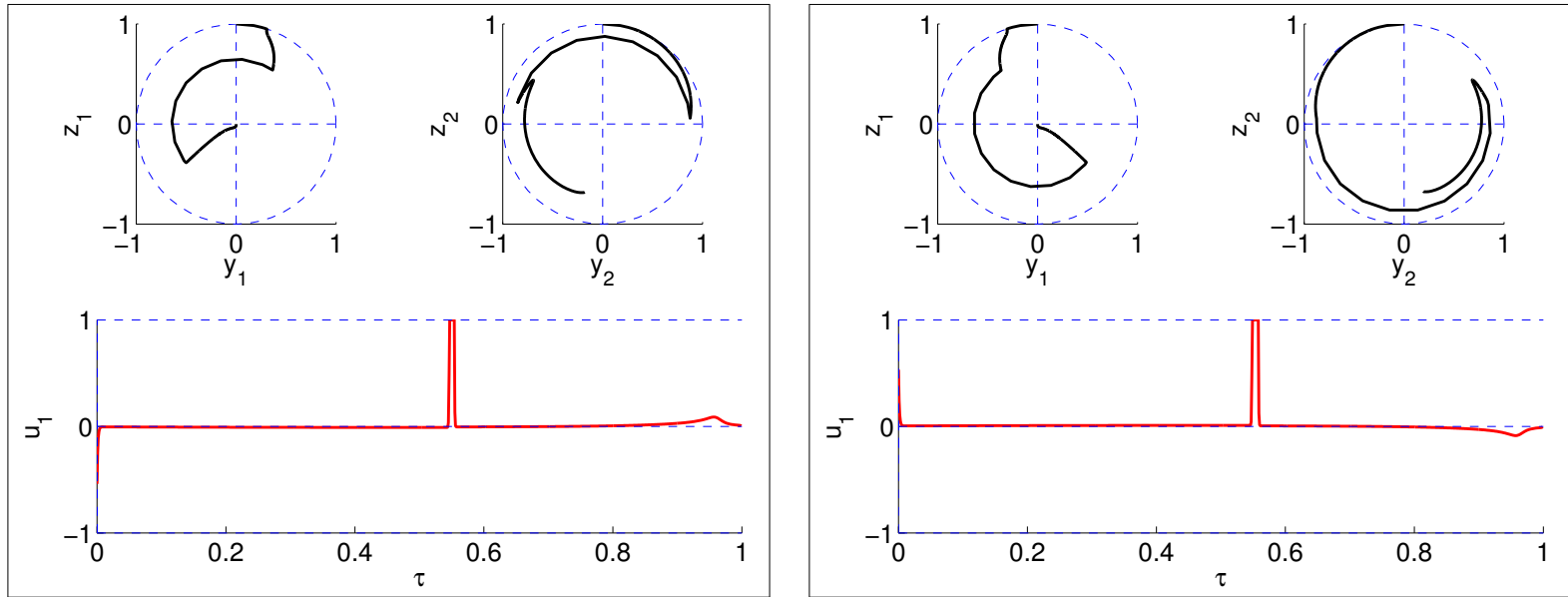


Figure 8: Cas du fluide,  $t_f = 2.0T_{\min}$ . Le contraste est de 0.705 pour la solution  $\delta_- \delta_s \delta_+ \delta_s$  et 0.702 pour la solution  $\delta_+ \delta_s \delta_+ \delta_s$ .

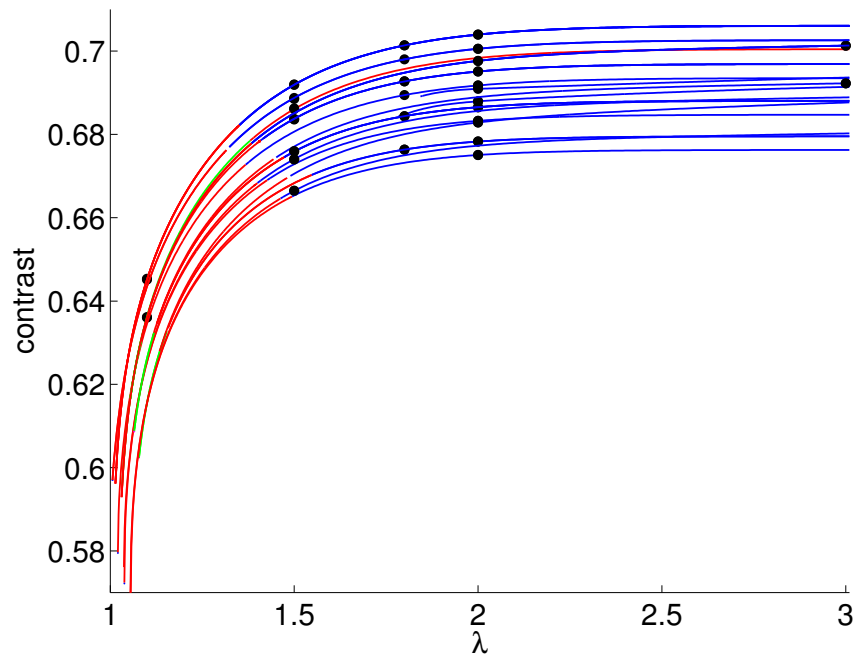
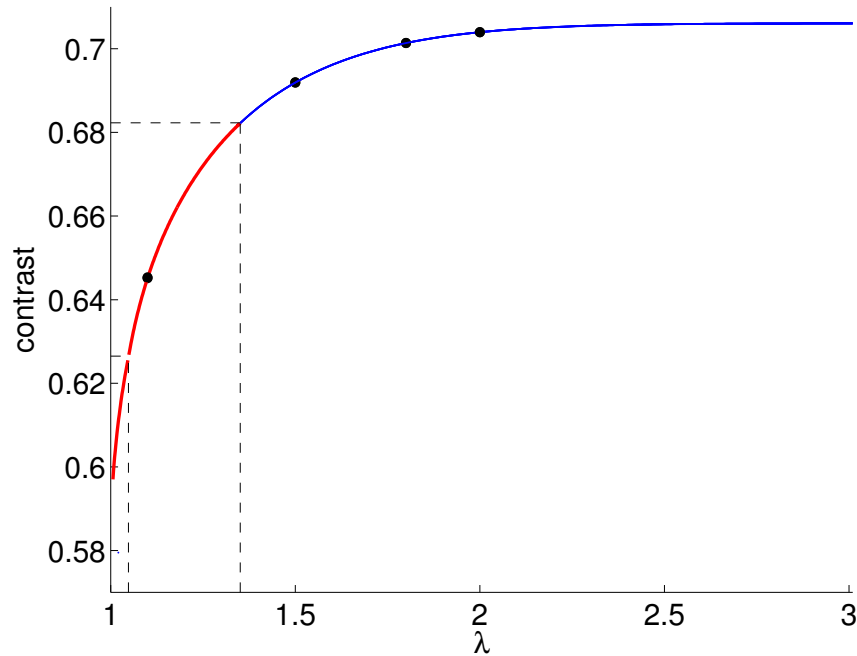


Figure 9: Contraste en fonction de  $\lambda = t_f/T_{\min}$  entre 1 et 3.  
Structures des solutions : 4BS (vert), 3BS (rouge), 2BS (bleu).

# 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



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

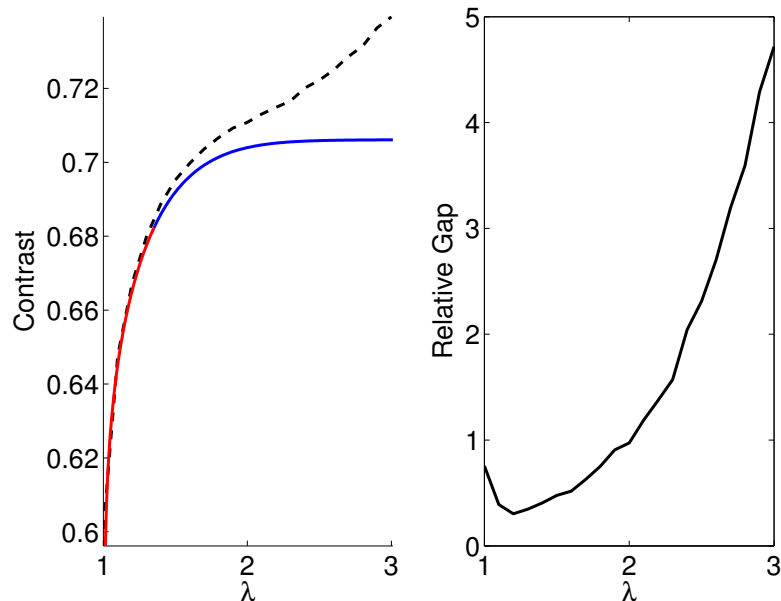


Figure 10: Bornes supérieures (tirets,  $LMI$ ) comparées à la synthèse (trait plein,  $HamPath$ ).

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

- 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.

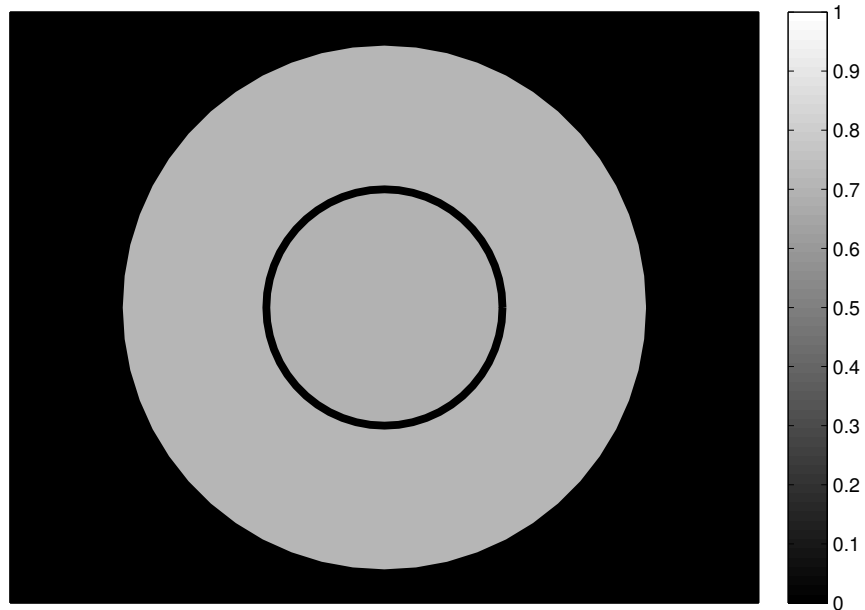


Figure 11: Exemple visuel d'écart relatif de 2% pour le cas du fluide. Les normes des vecteurs magnétiques des spins des cercles intérieur et extérieur valent resp. 0.7 et 0.714.

- 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.