

Contrôle Optimal Géométrique : Méthodes Homotopiques et Applications

Soutenance de thèse à l'Université de Bourgogne de Olivier COTS



Rapporteurs : U. Boscain - DR, Ecole Polytechnique*
E. Trélat - PR, Univ. Paris VI*



Président : J.-M. Coron - PR, Univ. Paris VI*

Examineurs : B. Bonnard - PR, Univ. Bourgogne*
P. Martinon - CR, INRIA
M. Mirrahimi - DR, INRIA



Directeurs : J.-B. Caillau - PR, Univ. Bourgogne*
J. Gergaud - PR, Univ. Toulouse*



Dijon, le 20 septembre 2012.



- Bernard Bonnard (Univ. Bourgogne)
- Jean-Baptiste Caillau (Univ. Bourgogne)
- Joseph Gergaud (N7 - IRIT)
- Steffen J. Glaser (Univ. Munich)
- Marc Lapert (Univ. Bourgogne)
- Natalya Shcherbakova (N7 - IRIT)
- Dominique Sugny (Univ. Bourgogne)

CONTEXTE : CONTRÔLE OPTIMAL GÉOMÉTRIQUE APPLIQUÉ EN MÉCANIQUE CÉLESTE ET QUANTIQUE

- **Contrôle optimal** \equiv problème d'**optimisation en dimension infinie**
 - Coût sous forme intégrale ou ponctuel
 - Contraintes différentielles
- **Point de vue géométrique** \equiv **système hamiltonien**
 - Principe du Maximum de Pontryagin
 - Conditions du deuxième ordre d'optimalité locale (notion de point conjugué)
- **Mécanique céleste** : transfert orbital de satellite autour de la Terre à consommation minimale pour valider la démarche.
- **Contrôle quantique** :
 - minimisation de l'énergie pour un système quantique dissipatif à deux niveaux d'énergie.
 - **problème de contraste** en imagerie par Résonance Magnétique Nucléaire.

$$(P_\lambda) \left\{ \begin{array}{ll} \min g(x(t_f), \lambda) + \int_0^{t_f} f^0(x(t), u(t), \lambda) dt & \text{Fonction coût} \\ \dot{x}(t) = f(x(t), u(t), \lambda) & \text{Contraintes différentielles} \\ b_0(x(0), \lambda) = 0 \in \mathbb{R}^{n_0} & \text{Conditions initiales} \\ b_f(x(t_f), \lambda) = 0 \in \mathbb{R}^{n_1} & \text{Conditions finales} \end{array} \right.$$

où

- $t \in [0, t_f]$, t_f libre ou fixé,
- $x(t) \in \mathbb{R}^n$: l'état,
- $u(t) \in \mathbf{U} \subset \mathbb{R}^m$: ensemble des contrôles admissibles,
- $\lambda \in \mathbb{R}$: un paramètre,
- b_0, b_f, g, f^0 et f sont analytiques,
- $n_0, n_1 \leq n$.

INTRODUCTION : TRANSFERT ORBITAL

$$(P) \left\{ \begin{array}{l} \min \int_0^{t_f} |u| dt \iff \max m(t_f) \\ \dot{r} = v \\ \dot{v} = -\frac{\mu_0}{|r|^3} r + T_{\max} \frac{u}{m} \\ \dot{m} = -\beta T_{\max} |u| \\ |u| \leq 1 \\ \text{conditions initiales et finales} \\ t_f \text{ libre} \end{array} \right.$$

$|u|$: norme euclidienne

Solution de type **bang-bang**, *i.e.* la norme du contrôle n'est **pas continue** et commute entre les valeurs 0 et 1.

\Rightarrow Besoin de **régulariser (déformer)** pour détecter les commutations et résoudre le problème.

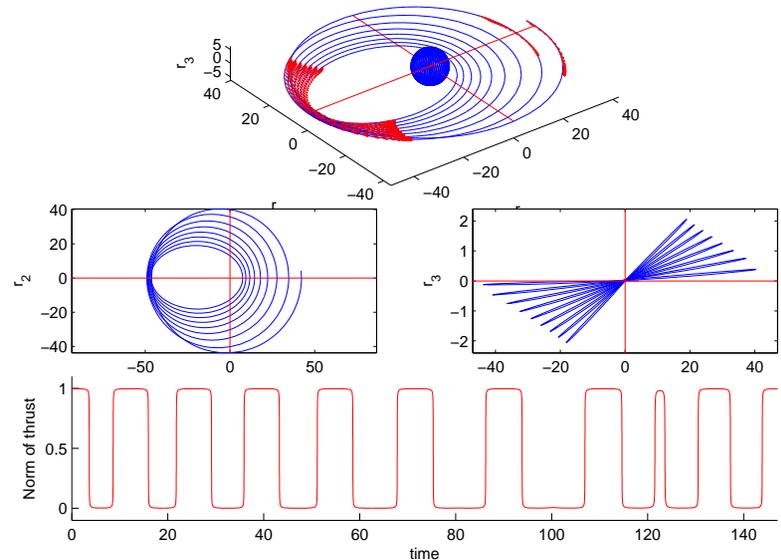


Figure 1: Trajectoire optimale et norme du contrôle optimal pour $T_{\max} = 10\text{N}$.

Alignement moléculaire. Contrôle de la **rotation moléculaire** par **champ laser** en phase gazeuse. Le système à deux niveaux d'énergie est un modèle approché.

Dynamique de Spin-1/2. Contrôle par **champ magnétique** de molécules de **spin-1/2** en phase liquide. Modèle exact pour des applications en spectroscopie ou imagerie médicale par Résonance Magnétique Nucléaire.

Equations de Lindblad.

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

où l'on pose $\delta = \Gamma - \gamma$.

Démarche.

- | | |
|---|---|
| 1) Cas intégrable ($\tilde{\gamma} = 0$)
(Solutions analytiques connues) | \Rightarrow Déformation des trajectoires
($\tilde{\gamma} \neq 0$) |
| 2) Cas de Grushin ($\delta = \tilde{\gamma} = 0$)
(Synthèse globale* connue) | \Rightarrow Déformation de la synthèse
($\tilde{\gamma} = 0$ et $\delta \neq 0$) |

* Connaissances des trajectoires mais aussi des lieux où l'optimalité locale, globale est perdue.

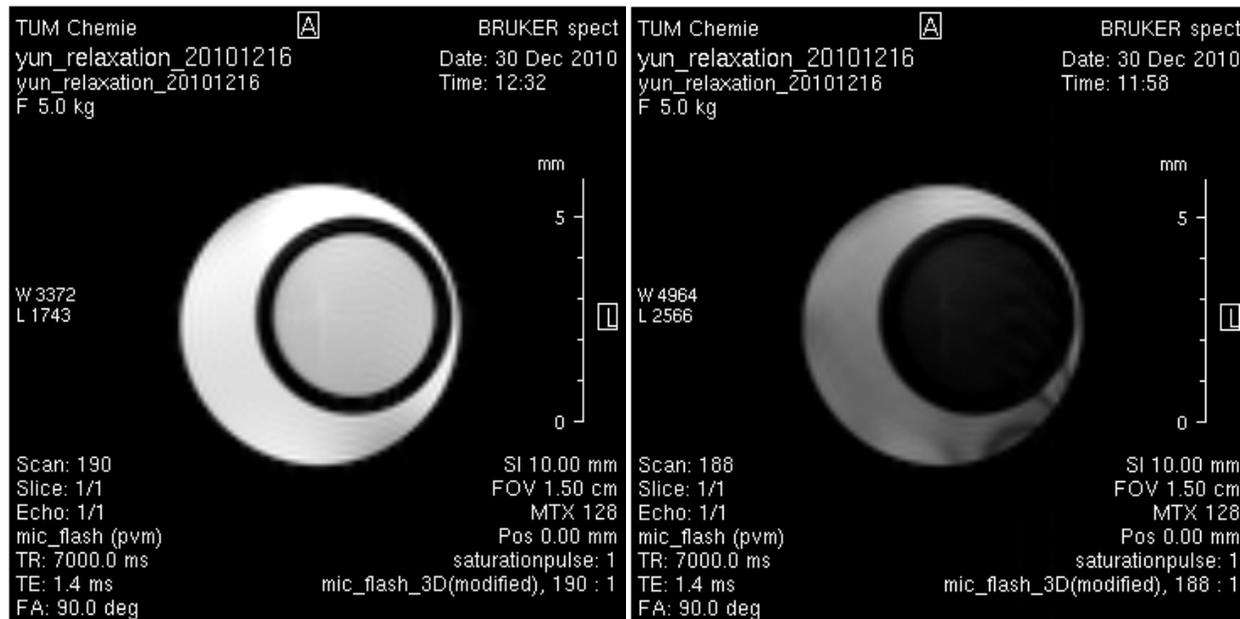


Figure 2: (GAUCHE) Solution témoin. (DROITE) Solution optimale.

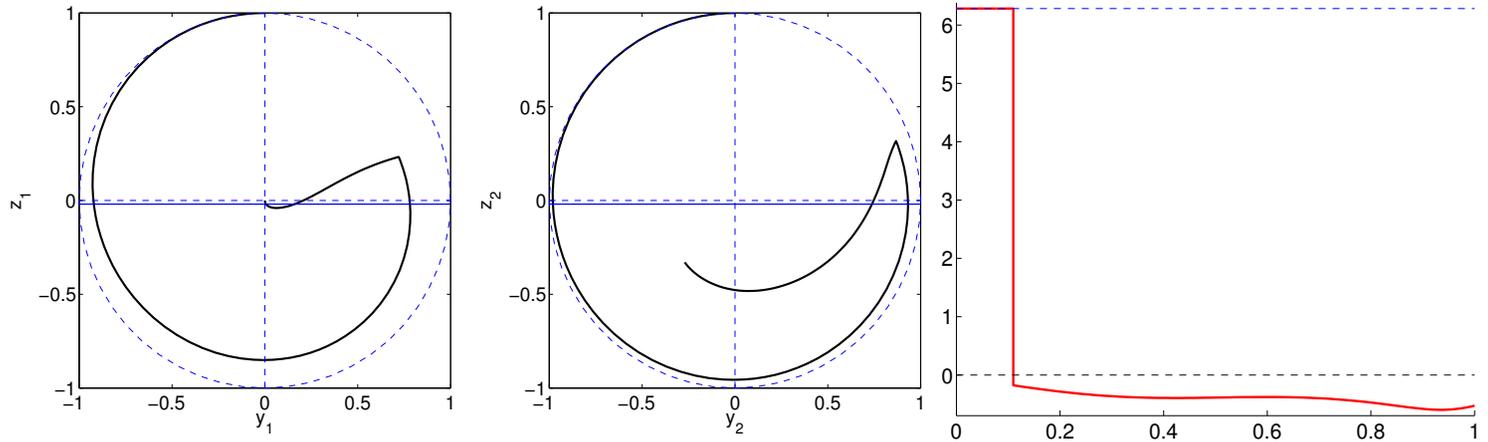


Figure 3: Trajectoire des spins 1, 2 et le contrôle **bang-singulier** associé (cas du sang).

Solution de type **bang-singulier**, *i.e.* le contrôle n'est **pas continu** et il existe des arcs saturant la contrainte et d'autres non saturants.

⇒ Besoin de **régulariser (déformer)** pour détecter le type de structure (nombre et nature des arcs) puis résoudre le problème.

Démarche.

1. Quel est la nature des solutions attendues ?
2. On déforme le problème pour se ramener à quelque chose de plus simple, voire de connu, sur lequel on se base.
3. On étudie la déformation nous ramenant au problème voulu.
4. On résout finalement le problème de départ.

Plan.

1. Les outils géométriques et numériques.
2. L'exemple du problème de contraste en RMN.

Théorème 1 (Principe du Maximum de Pontryagin).

Si le contrôle admissible u est optimal sur $[0, t_f]$, alors $\exists p : [0, t_f] \rightarrow \mathbb{R}^n$ absolument continue et une constante $p^0 \leq 0$, $(p, p^0) \neq 0$, telles que pour presque tout $t \in [0, t_f]$

$$\begin{aligned} \dot{x}(t) &= \frac{\partial H}{\partial p}(x(t), p(t), p^0, u(t)), \\ \dot{p}(t) &= -\frac{\partial H}{\partial x}(x(t), p(t), p^0, u(t)), \\ H(x(t), p(t), p^0, u(t)) &= \max_{u \in \mathbf{U}} H(x, p, p^0, u), \end{aligned} \tag{1}$$

$H(x, p, p^0, u) := p^0 f^0(x, u) + \langle p, f(x, u) \rangle$ est le Hamiltonien du système, où $\langle \cdot, \cdot \rangle$ est le crochet de dualité.

Conditions de transversalité :

$$p(0) \perp T_{x(0)} M_0, \quad p(t_f) - p^0 \frac{\partial g}{\partial x}(t_f, x(t_f)) \perp T_{x(t_f)} M_1. \tag{2}$$

Définition 1. Une **extrémale** du problème de contrôle optimal est un quadruplet $(x(\cdot), p(\cdot), p^0, u(\cdot))$ solution des équations (1).

Définition 2. Une extrémale $(x(\cdot), p(\cdot), p^0, u(\cdot))$ solution de (1) est dite **anormale** si $p^0 = 0$ et **normale** dans le cas contraire. Une extrémale est dite **singulière** si $\partial_u H = 0$.

Corollaire 1. Si $H(x, p) := \max_{u \in U} H(x, p, p^0, u)$ est défini et lisse sur un voisinage de l'extrémale $z := (x, p) : [0, t_f] \rightarrow \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$, alors pour presque tout $t \in [0, t_f]$

$$\dot{z}(t) = \vec{H}(z(t)) = \left(\frac{\partial H}{\partial p}(z(t)), -\frac{\partial H}{\partial x}(z(t)) \right),$$

et $H(x, p)$ est le **Hamiltonien vrai** (il ne dépend plus de u).

Remarque 1. On considère U étant une **variété sans bord** (i.e. il n'y a pas de contrainte sur u) \Rightarrow la condition de maximisation dans (1) implique $\partial_u H = 0$ et on a la condition nécessaire suivante.

Proposition 1 (CN de Legendre). *Si la trajectoire $x(\cdot)$ associée au contrôle $u(\cdot)$, non contraint, est optimale sur $[0, t_f]$ pour la topologie L^∞ , alors la **condition de Legendre** est vérifiée le long de l'extrémale $(x(\cdot), p(\cdot), p^0, u(\cdot))$, c'est à dire*

$$\frac{\partial^2 H}{\partial u^2}(x(t), p^0, p(t), u(t)) \cdot (v, v) \leq 0, \quad \forall v \in \mathbb{R}^m, \quad \forall t \in [0, t_f]. \quad (3)$$

Définition 3. Une extrémale $(x(\cdot), p(\cdot), p^0, u(\cdot))$ est dite **totale-ment singulière** si $\partial_{uu} H = 0, \forall t \in [0, t_f]$. On dit que l'on se trouve dans un **cas régulier** si l'équation (3) est **stricte** le long de l'extrémale.

$$(P_\lambda) \begin{cases} \min g(x(t_f), \lambda) + \int_0^{t_f} f^0(x(t), u(t), \lambda) dt \\ \dot{x}(t) = f(x(t), u(t), \lambda) \\ b_0(x(0), \lambda) = 0 \in \mathbb{R}^{n_0} \\ b_f(x(t_f), \lambda) = 0 \in \mathbb{R}^{n_1} \end{cases}$$

Cadre régulier.

- l'ensemble U est une **variété sans bord** ($u(t) \in \mathbb{R}^m$ en coordonnées),
- la conditions de Legendre (3) est **stricte** (*i.e.* $\frac{\partial^2 H}{\partial u^2} < 0$),
- les extrémales sont **normales** (*i.e.* $p^0 \neq 0$),
- les conditions aux deux bouts sont ponctuelles $x(0) = x_0$ et $x(t_f) = x_f$,
- Le temps final t_f est **fixé**,
- f, f^0, g sont **analytiques**,

Définition 4. Une **solution** de l'équation linéarisée le long de z , *i.e.* de l'équation de Jacobi

$$\delta\dot{z}(t) = d\vec{H}(z(t))\delta z(t),$$

est appelée un **champ de Jacobi**. Un champ de Jacobi $\delta z = (\delta x, \delta p) \in \mathbb{R}^{2n}$ en coordonnées locales, est dit **vertical au temps t si $\delta x(t) = 0$** .

Proposition 2. *Un instant $s \in]0, t_f]$ est un **temps conjugué** le long d'une extrémale régulière si et seulement s'il existe un champ de Jacobi $\delta z = (\delta x, \delta p)$ **vertical en 0 et s** , tel que $\delta x \neq 0$ sur $[0, s]$.*

Rappel. $\vec{H}(z(t)) = \left(\frac{\partial H}{\partial p}(z(t)), -\frac{\partial H}{\partial x}(z(t)) \right)$.

Théorème 2 (CS2). *Si $(\bar{x}(\cdot), \bar{p}(\cdot), p^0, \bar{u}(\cdot))$ est une extrémale normale ($p^0 \neq 0$), régulière, au voisinage de laquelle le Hamiltonien maximisé est lisse, alors l'absence de temps conjugué sur $]0, t_f]$ est une condition suffisante d'optimalité locale pour la topologie L^∞ .*

Calcul des conditions du deuxième ordre On calcule les n champs de Jacobi $\delta z_i = (\delta x_i, \delta p_i)$, $i = 1, \dots, n$, ayant pour conditions initiales $\delta x_i(0) = 0$, $\delta p_i = e_i$, $i = 1, \dots, n$, où $(e_i)_{i=1, \dots, n}$ est la base canonique de \mathbb{R}^n . Alors

$$\det \left(\delta x_1(t_c), \dots, \delta x_n(t_c) \right) = 0,$$

pour t_c un temps conjugué.

- $(P_\lambda) \Rightarrow$ conditions de maximisation (1) et aux extrémités (2) du PMP donne

$$(TPBVP) \begin{cases} \dot{z}(t) = \vec{H}(z(t), \lambda) \\ E(z(0), z(t_f), \lambda) = 0 \end{cases} \quad (4)$$

- On définit la **fonction de tir simple** S_λ (t_f est fixé) par

$$\begin{aligned} S_\lambda : \mathbb{R}^{2n} &\longrightarrow \mathbb{R}^{2n} \\ z_0 &\longmapsto S_\lambda(z_0) := E(z_0, z(t_f, z_0, \lambda), \lambda) \end{aligned}$$

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

- Résoudre (4) $\equiv S_\lambda(z_0) = 0$.

Ainsi, la **méthode de tir simple** consiste à chercher un zéro de la fonction S_λ .

Pour résoudre $S_\lambda(z_0) = 0$, on utilise une méthode de type **Newton** : $z_{n+1} = z_n + b_n$,
 $S'_\lambda(z_n).b_n = -S_\lambda(z_n)$.

Il est important de bien calculer la jacobienne de la fonction de tir.

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

- On utilise la **différenciation automatique** pour calculer $\partial_{z_0} E$ et $\partial_{z_f} E$.
- Et $\partial_{z_0} z$ est solution des équations de Jacobi $\delta \dot{z}(t) = \partial_z \vec{H}(z(t), \lambda)$, $\delta z(0) = I_{2n}$.

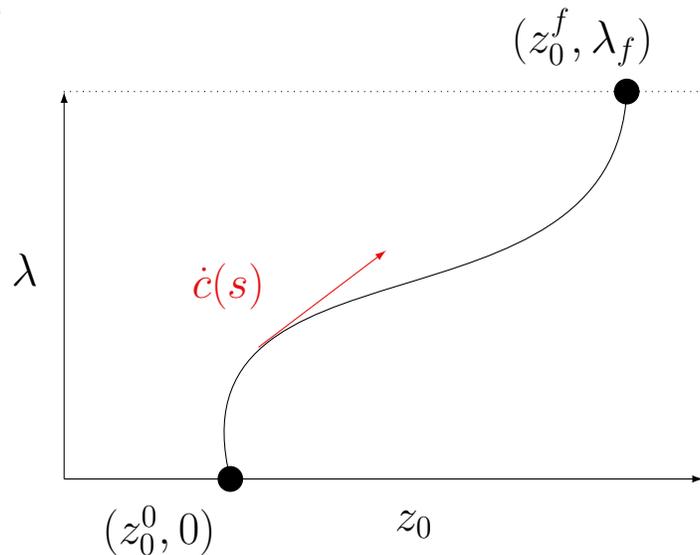
On définit la fonction homotopique

$$\begin{aligned} h : \mathbb{R}^{2n} \times [0, 1] &\longrightarrow \mathbb{R}^{2n} \\ (z_0, \lambda) &\longmapsto S_\lambda(z_0) \end{aligned}$$

avec $z_0 = (q_0, p_0)$.

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**.

On connaît un zéro de $h(\cdot, \lambda)$ pour $\lambda_0 = 0$ noté z_0^0 , et on veut suivre le chemin pour atteindre un zéro pour $\lambda = 1$ par exemple.



On utilise un intégrateur à pas variable de type RK(4)5 pour l'intégration numérique de :

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

où $c(s) = (z_0(s), \lambda(s))$ est paramétré par l'abscisse curviligne. On intègre jusqu'à s_f tel que $\lambda(s_f)$ soit suffisamment proche de 1 (par la sortie dense).

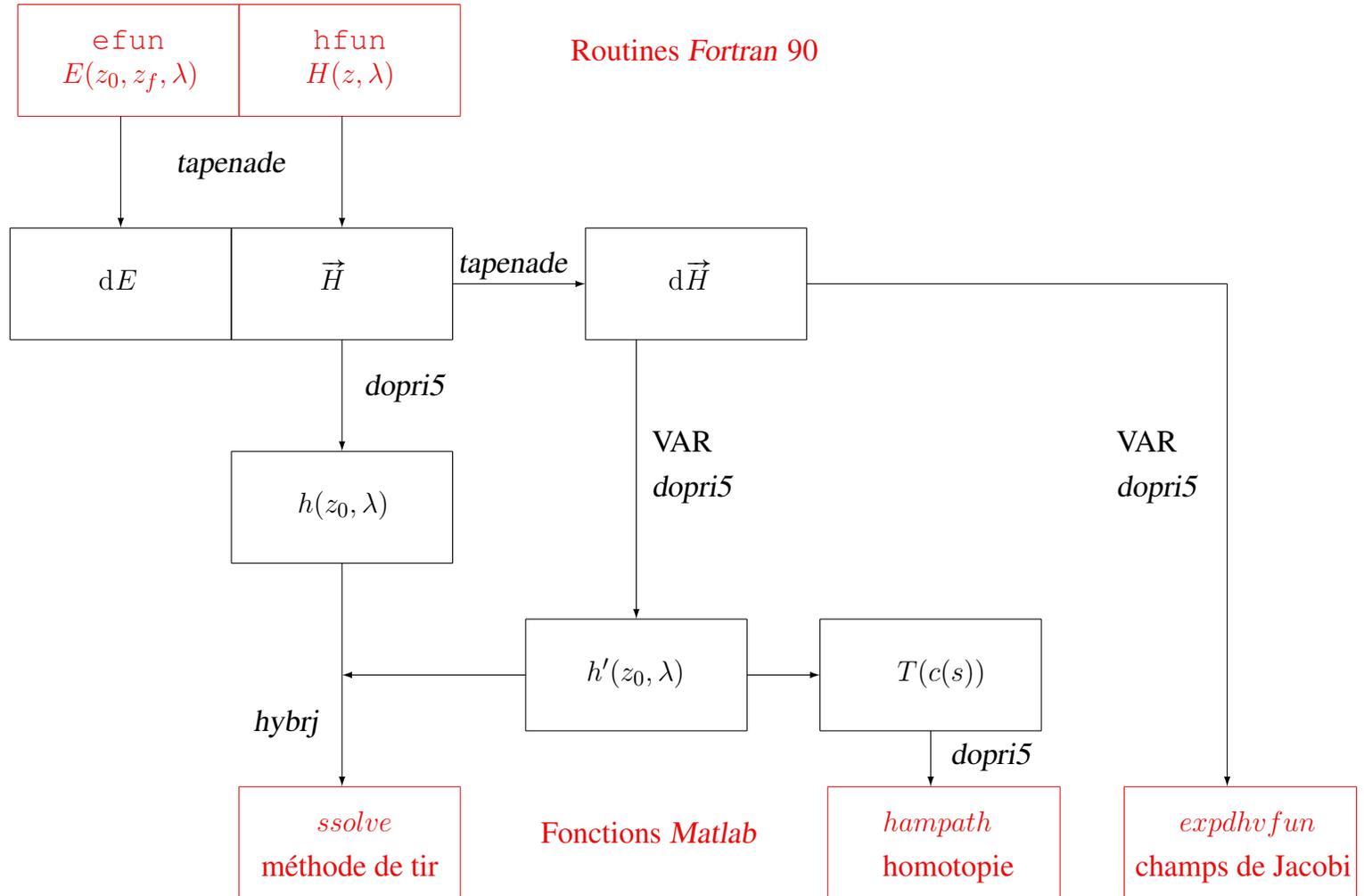
Calcul du vecteur tangent. Puisque $c(s)$ est un zéro de h ,

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

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

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

- Le code HAMPATH est l'évolution du package *COTCOT*.
- A partir du Hamiltonien vrai et des conditions aux extrémités, HAMPATH :
 - assemble \vec{H} et $d\vec{H}$ par différenciation automatique (*tapenade*),
 - produit la fonction de tir et résout en $\lambda = 0$ (*dopri5*, *hybrj*),
 - évalue les champs de Jacobi le long des extrémals calculées (cf. **jacobienne de la fonction de tir** et les conditions du deuxième ordre),
 - **fait le suivi de chemin (sans correction, dopri5)**,
 - inclut une méthode de **tir multiple**,
 - fournit une méthode de **tir simple avec détections des commutations** (inspiré de *ShootPackage*).
- C'est un noyau de calcul (intégration numérique, méthodes de Newton) en *Fortran*. Il utilise des bibliothèques efficaces telles que *Minpack*, *Lapack*, *Blas*, et est interfacé avec *Matlab* pour l'utilisation.



Equations de Bloch Considérons deux systèmes d'équations bilinéaires 2D **couplées** par un même contrôle scalaire.

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

- 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 $|u| \leq 2\pi$.

Saturation du premier spin La magnétisation du premier spin est mise à zéro

$$q_1(t_f) = (0, 0)$$

Maximisation du contraste La distance à l'origine en t_f du spin 2 est maximisée

$$|q_2(t_f)|^2 = y_2^2(t_f) + z_2^2(t_f) \rightarrow \max$$

Etat initial Le point d'équilibre du système non contrôlé (*i.e.* le pôle nord) est le point initial pour chaque spin : $q_1(0) = q_2(0) = (0, 1)$.

Equations de Bloch

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

1) Cas du sang.

Spin 1 (y_1, z_1) - Sang désoxygéné : $T_{11} = 1350$ ms, $T_{12} = 50$ ms

Spin 2 (y_2, z_2) - Sang oxygéné : $T_{21} = 1350$ ms, $T_{22} = 200$ ms

2) Cas du fluide.

Spin 1 (y_1, z_1) - Liquide cébrospinal : $T_{11} = 2000$ ms, $T_{12} = 200$ ms

Spin 2 (y_2, z_2) - Eau : $T_{21} = 2500$ ms, $T_{22} = 2500$ ms

où $\gamma_i = 1/(32.3T_{i1}.10^{-3})$ et $\Gamma_i = 1/(32.3T_{i2}.10^{-3})$.

- On a un problème (P) de type Mayer : $\min_{u \in U} c(q(t_f))$, $\dot{q} = F(q) + uG(q)$,
 où $-c(q(t_f)) = -(y_2^2(t_f) + z_2^2(t_f))$
 - $F(q) = \sum_{i=1,2} (-\Gamma_i y_i) \frac{\partial}{\partial y_i} + (\gamma_i(1 - z_i)) \frac{\partial}{\partial z_i}$
 - $G(q) = \sum_{i=1,2} -z_i \frac{\partial}{\partial y_i} + y_i \frac{\partial}{\partial z_i}$
- Hamiltonien : $H(q, p, u) = H_F(q, p) + uH_G(q, p)$, $H_F := \langle p, F \rangle$, $H_G := \langle p, G \rangle$
Remarque 2. $\partial_{uu}H = 0 \Rightarrow$ n'entre pas dans le cadre régulier.
- Condition de maximisation : $\begin{cases} u = 2\pi \operatorname{sign}(H_G) \text{ est bang} & \text{si } H_G \neq 0 \\ u \text{ est singulier} & \text{si } H_G = 0 \end{cases}$
- Conditions aux extrémités : $q_1(t_f) = 0$ et $p_2(t_f) = -2p^0 q_2(t_f)$, $p^0 \leq 0$.

Lemme 1. *L'extrémale vérifiant les conditions aux extrémités la plus simple est de la forme B^+S .*

- Le pôle nord $N = ((0, 1), (0, 1)) = x(0)$ est un point d'équilibre pour le système singulier ($u_s = 0$) : **on part d'un bang**, choisi positif (*i.e.* $u = +2\pi$) par symétrie.
- Un arc bang revient presque à une rotation dans chaque plan (y_i, z_i) autour de 0. En t_f , $q_1(t_f) = 0$, et il n'y a pas d'amélioration du contraste par rotation (car $T_{21} > T_{22}$) : **on finit par un singulier.**

EXTRÉMALES SINGULIÈRES

Le Hamiltonien est $H(q, p, u) = H_F(q, p) + u H_G(q, p)$.

Soit $z(\cdot) = (q(\cdot), p(\cdot))$ une **extrémale singulière**, alors $H_G(z(\cdot)) = 0$. En dérivant par rapport au temps,

$$\left. \begin{array}{l} H_G(z(t)) = 0 \\ \frac{dH_G}{dt}(z(t)) = \{H, H_F\}(z(t)) = \{H_G, H_F\}(z(t)) = 0 \end{array} \right\} \text{(2 contraintes)}$$

$$\frac{d^2 H_G}{dt^2}(z(t)) = \{\{H_G, H_F\}, H_F\}(z(t)) + u_s(t) \{\{H_G, H_F\}, H_G\}(z(t)) = 0$$

De plus,

+ On peut restreindre p à $H_s = h$ en raison de l'homogénéité : $u_s(q, \alpha p) = u_s(q, p)$.

+ La condition de Legendre généralisée $\{\{H_G, H_F\}, H_G\} \geq 0$ est nécessaire.

\Rightarrow pour chaque $q(0) \in \mathbb{R}^4$, $p(0) \in \mathbb{R}^4$ appartient à une demi-droite et le **flot singulier** partant de $q(0)$ forme une **surface de dimension 2**.

EXTRÉMALES SINGULIÈRES DANS LE CAS DU FLUIDE

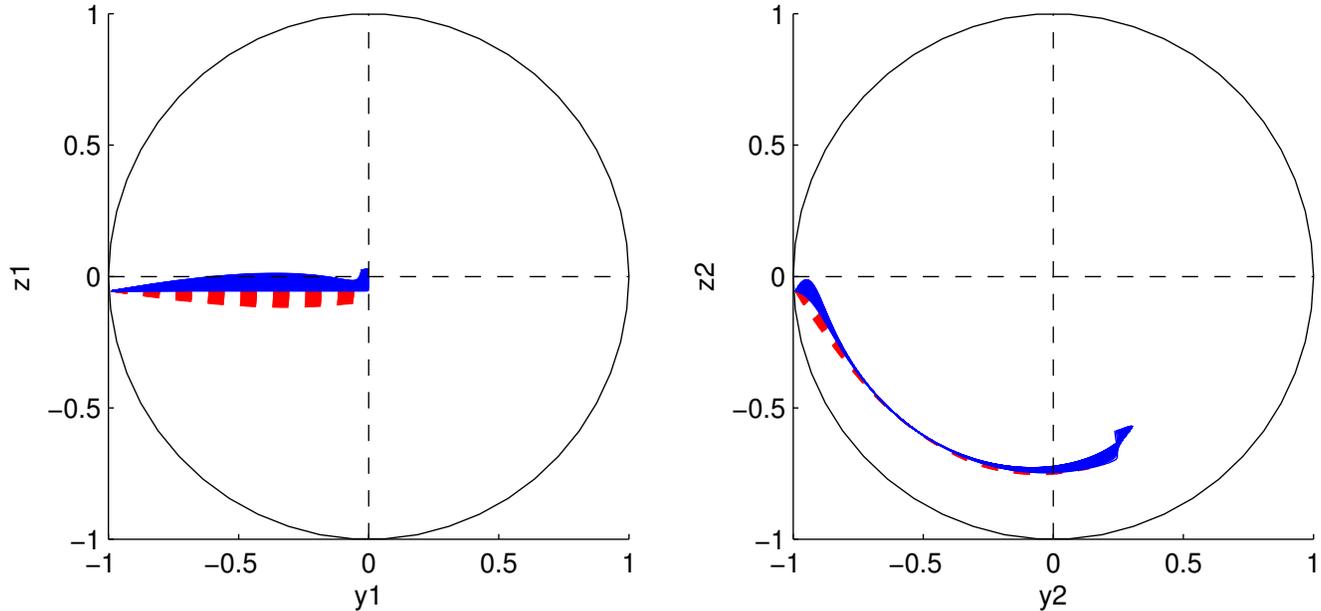


Figure 4: Surface singulière en bleu et rouge. En traits rouges le flot singulier n'est pas défini de manière globale, le contrôle explose en temps fini pour chaque extrémale.

EXTRÉMALES SINGULIÈRES DANS LE CAS DU FLUIDE

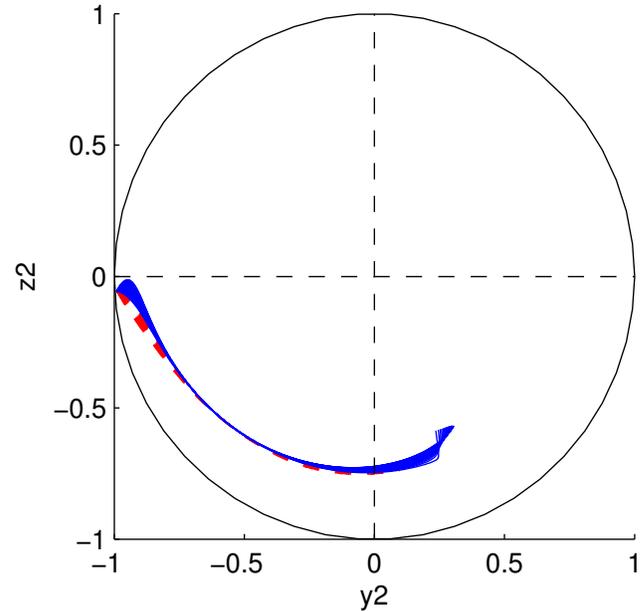
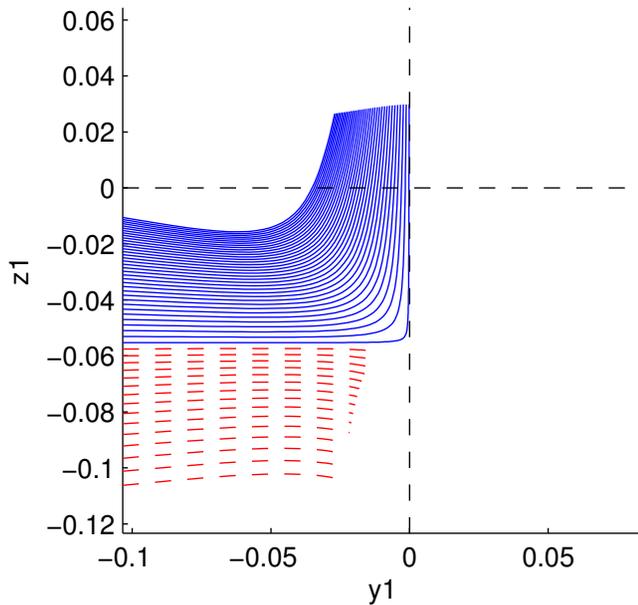


Figure 5: En tirets rouges le flot singulier n'est pas défini de manière globale, le contrôle explose en temps fini pour chaque extrémale.

Définition 5. Soit $z(\cdot)$ une solution singulière de référence de \vec{H}_s sur $[0, t_f]$. Les équations variationnelles sur l'espace tangent à $\Sigma_s := \{H_G = \{H_F, H_G\} = 0\}$

$$\begin{aligned}\delta\dot{z} &= d\vec{H}_s(z(t))\delta z \\ dH_G &= d\{H_F, H_G\} = 0\end{aligned}$$

sont appelées équations de Jacobi.

- Un champ de Jacobi $J(t) = (\delta q, \delta p)$ est une solution non triviale de ces équations.
- Il est dit **semi-vertical** au temps t si $\delta q(t) \in \mathbb{R}G(q(t))$.
- Un instant $t \in]0, t_f]$ est dit **conjugué** s'il existe un champ de Jacobi $J(t)$ semi-vertical en 0 et t .

Théorème 3. *Sous la condition de Legendre généralisée stricte (i.e. $\{\{H_G, H_F\}, H_G\} > 0$) et d'autres hypothèses génériques, l'absence de temps conjugué sur $]0, t_f[$ est nécessaire pour assurer l'optimalité locale d'un arc singulier.*

POINTS CONJUGUÉS POUR LE FLOT SINGULIER DANS LE CAS DU FLUIDE

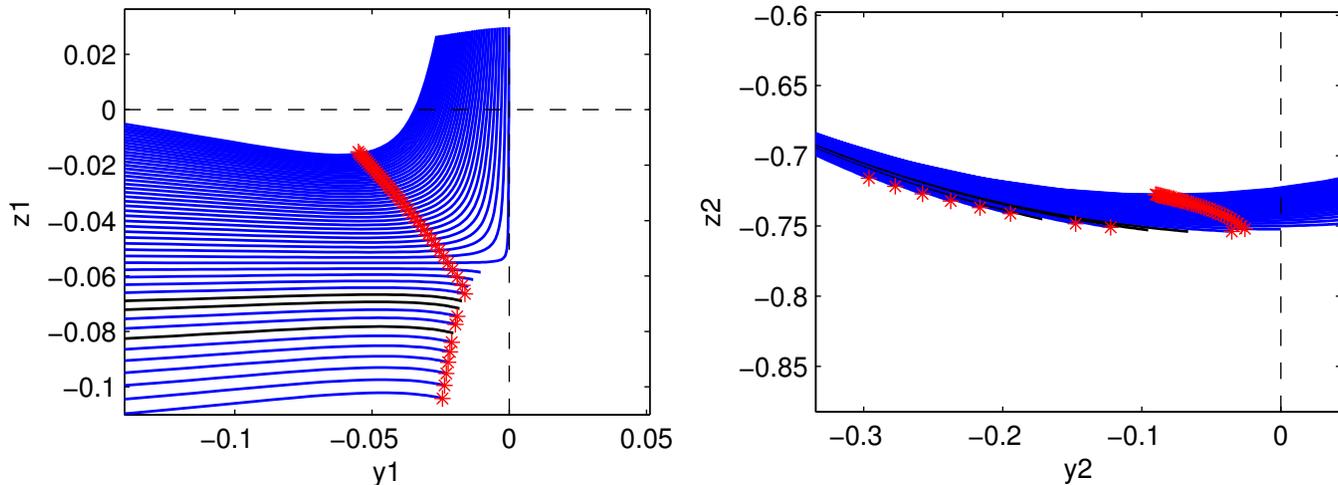


Figure 6: Zoom de la surface singulière avec les points conjugués en rouge.

⇒ On s'attend à une structure plus complexe que BS dans le cas du fluide.

LE CAS LIMITE $t_f = T_{\min}$: PROBLÈME À UN SEUL SPIN 1/3

$$\left\{ \begin{array}{l} t_f \rightarrow \min \\ \dot{y} = -\Gamma y - u z \\ \dot{z} = \gamma(1-z) + u y \\ q(0) = (0, 1) \\ q(t_f) = (0, 0) \end{array} \right.$$

Dynamique : $\dot{q} = F(q) + u G(q) \quad q = (x, y), |q| \leq 1, |u| \leq 2\pi$

Hamiltonien : $H(q, u, p) = H_F(q, p) + u H_G(q, p)$

⇒ Les **extrémales singulières** sont contenues dans $H_G = 0$.

⇒ Les **extrémales singulières** sont contenues dans $H_G = 0$.

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

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

• Deux lignes singulières :

- **Ligne horizontale** ($z_0 = \frac{\gamma}{2\delta}$) : optimale selon la condition de Legendre généralisée et le contrôle feedback est donné par $u_s(q) = \gamma(2\Gamma - \gamma)/(2\delta y) \Rightarrow u_s \in L^1$, $u_s \notin L^2$.
- **Ligne verticale** ($y = 0$) : optimale pour $z_0 < z < 1$ (CLG) et $u_s(q) = 0$.

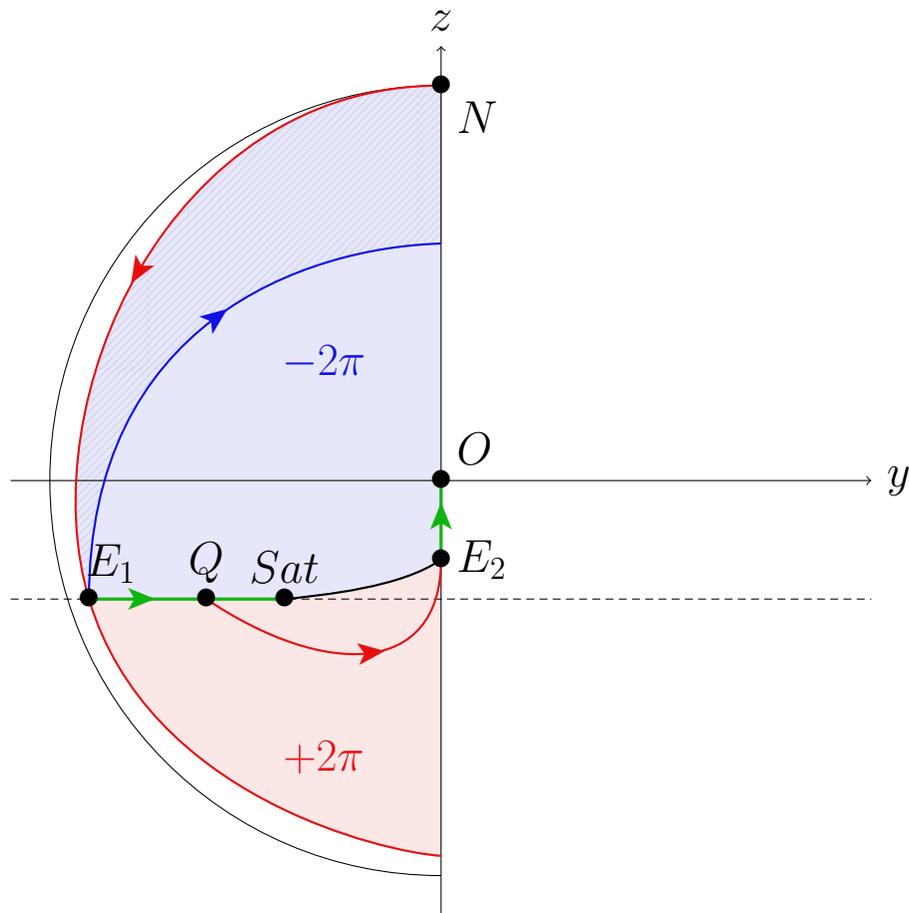


Figure 7: Synthèse optimale partant du pôle nord, pour un seul spin : La trajectoire optimale en temps minimal pour rejoindre le centre est NE_1QE_2O .

RÉSUMÉ : UN SEUL SPIN \Rightarrow PROBLÈME DE CONTRASTE

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

Quelle est la nature des solutions pour $t_f > T_{\min}$?

\Rightarrow Pour $t_f > T_{\min}$ donné, on utilise une **approche homotopique** pour régulariser le problème (se ramener au cadre régulier) puis capturer la structure et initialiser une méthode de **tir multiple**.

Homotopie (P_λ) : $-(y_2^2(t_f) + z_2^2(t_f)) + (1 - \lambda) \int_0^{t_f} |u|^{2-\lambda}(t) dt \rightarrow \min$

Le Hamiltonien : $H(q, u, p, \lambda) = H_F(q, p) + u H_G(q, p) - (1 - \lambda) |u|^{2-\lambda}$

$$\lambda < 1 \text{ ("cadre régulier")} \Rightarrow u = \text{sign}(H_G) \min \left(2\pi, \left(\frac{2|H_G|}{((2-\lambda)(1-\lambda))} \right)^{\frac{1}{(1-\lambda)}} \right)$$

Pour résoudre le problème (P) en $\lambda = 1$, on :

- 1) résout tout d'abord par **tir simple** le problème en $\lambda = 0$ facilement,
- 2) utilise **les méthodes homotopiques** pour résoudre la famille (P_λ) , pour $\lambda = 0$ à $\lambda = \lambda_f < 1$, pour ...
- 3) ... **capturer la structure** en (P) et **initialiser** la **méthode de tir multiple**.

Remarque 3. (P_λ) -extrémales sont **admissibles** pour (P) .

1) RÉSOUDRE EN $\lambda = 0$ PAR TIR SIMPLE : CAS DU SANG

- Le temps final t_f est fixé à $1.1T_{\min}$.
- Cas du sang :
 - Spin 1 = Sang désoxygéné : $T_{11} = 1350$ et $T_{21} = 200$
 - Spin 2 = Sang oxygéné : $T_{12} = 1350$ et $T_{22} = 50$

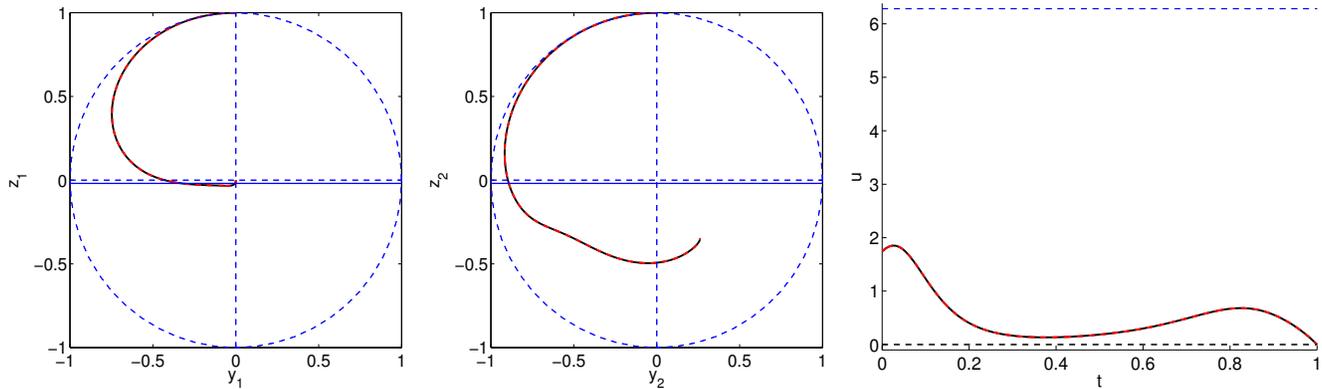


Figure 8: Solution pour $\lambda = 0$ avec la régularisation $L^{2-\lambda}$. Trajectoires des spins 1 et 2 et le contrôle associé.

2) LE CHEMIN DE ZÉROS : $\lambda_f = 0.915$: CAS DU SANG

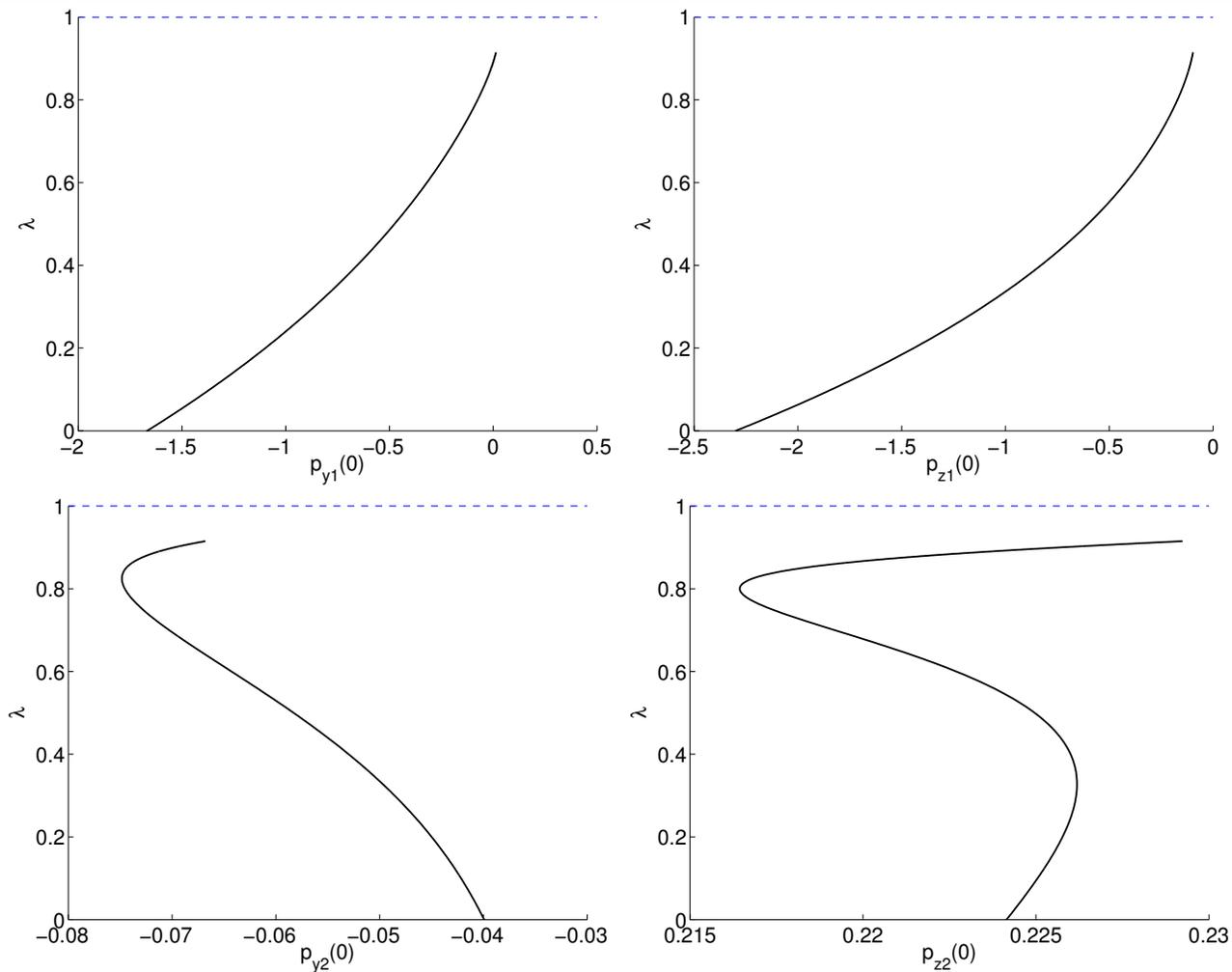
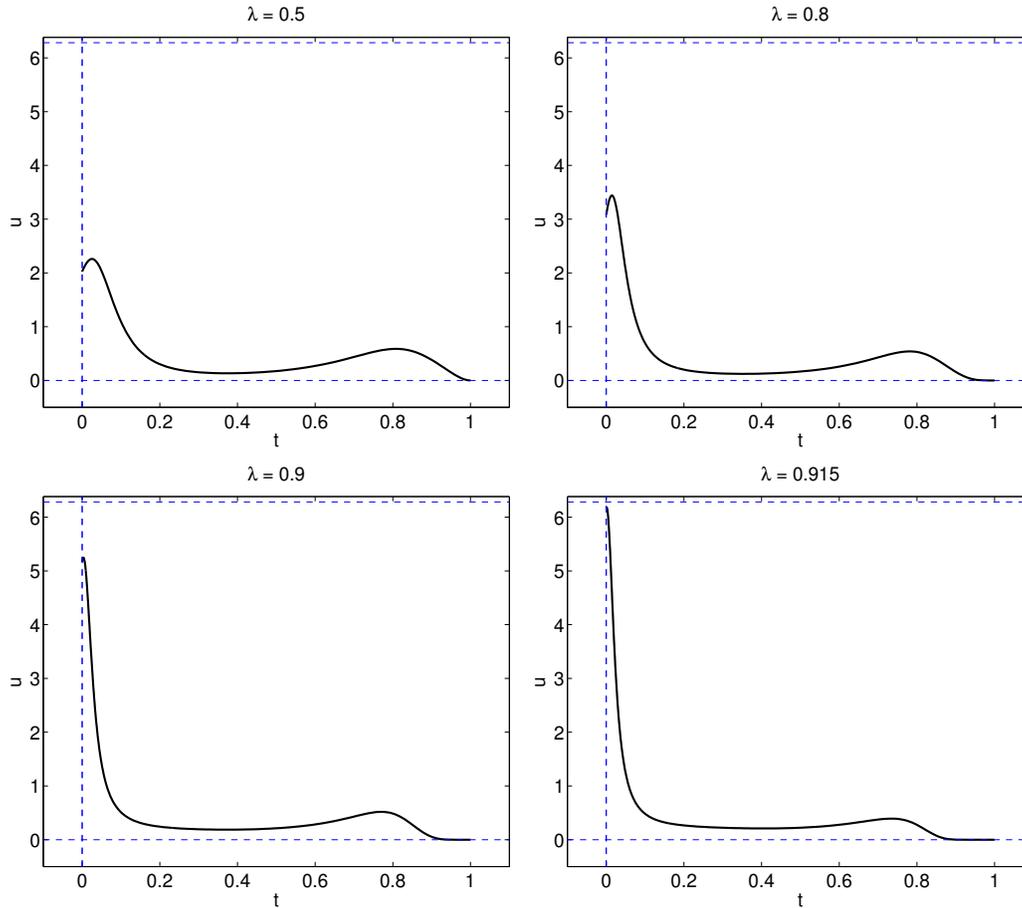


Figure 9: Chemin de zéros. Aucun point conjugué le long du chemin de zéros.

2) CONTRÔLE POUR $\lambda \in \{0.5, 0.8, 0.9, 0.915\}$: CAS DU SANG



\Rightarrow structure Bang-Singulière.

3) TIR MULTIPLE

On a une structure **BS** pour $t_f = 1.1T_{\min}$. 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 ($z = (q_1, q_2, p_1, p_2) \in \mathbb{R}^4 \times \mathbb{R}^4$).

- Hamiltonien :

$$H(q, u, p) = H_F(q, p) + u H_G(q, p), \begin{cases} u = 2\pi & \text{si } t \in [t_0; t_1] \\ u = u_{sing} & \text{si } t \in [t_1; t_f] \end{cases}$$

- Equations :

	<i>Bang</i>	<i>Sing</i>
(t_0, z_0)	$\longrightarrow (t_1, z_1)$	$\longrightarrow (t_f, z_f)$
$q_1 = (0, 1)$	$H_G = 0$	$q_1 = (0, 0)$
$q_2 = (0, 1)$	$\dot{H}_G = 0$	$q_2 = p_2$

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

SOLUTIONS : CAS DU SANG ($\lambda = 1.0$)

On utilise la solution en $\lambda = 0.915$ pour initialiser le tir multiple. Le temps t_1 est pris entre $[0.01, 0.2]$ et mène à différentes solutions.

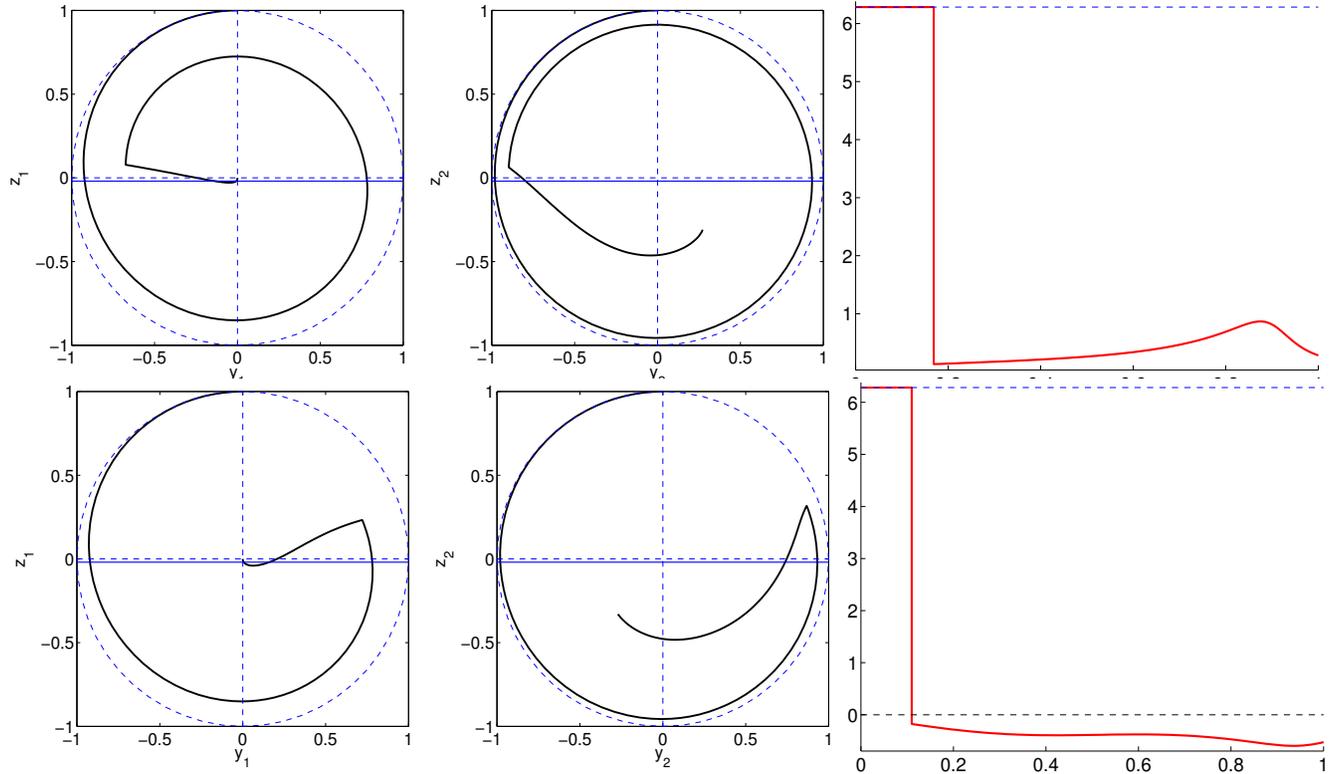


Figure 10: (HAUT) Première solution (contraste de 0.41). (BAS) Seconde solution (contraste de 0.42).

MEILLEURE SOLUTION : CAS DU SANG ($\lambda = 1.0$)

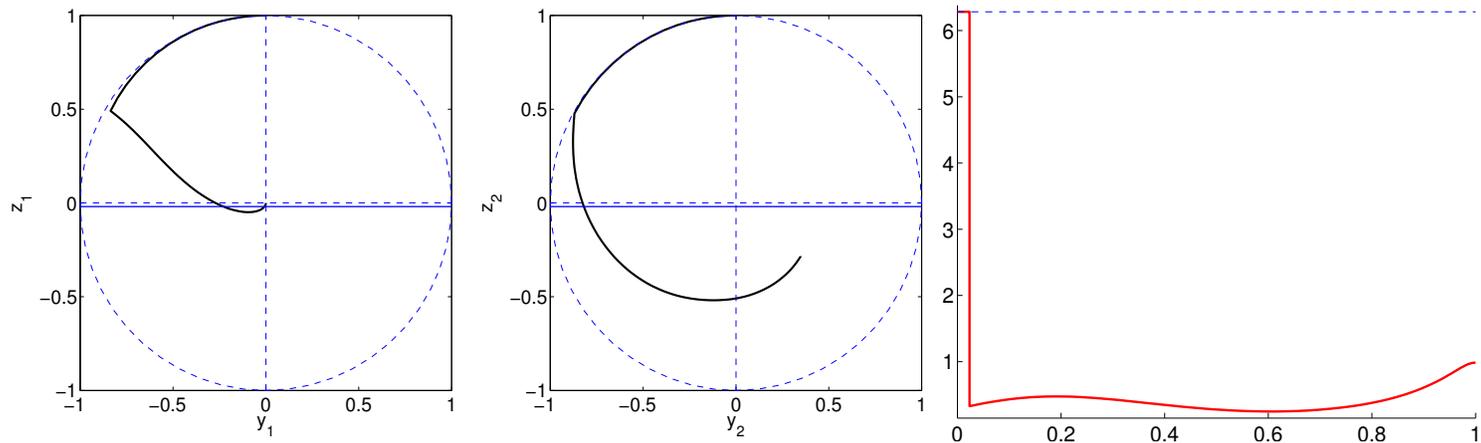


Figure 11: Meilleure solution (contraste de 0.45).

- Résoudre en $\lambda = 0$ est très simple.
- L'homotopie est automatisée : l'intégrateur numérique fournit la grille de pas.
- La régularisation $L^{2-\lambda}$ aura permis de trouver des solutions satisfaisant la condition nécessaire du premier ordre de la forme BS pour le cas du sang et $BSBS$ pour le cas du fluide.
- Présence de nombreuses solutions locales. On doit donc comparer toutes ces solutions.

SENSIBILITÉ PAR RAPPORT AU TEMPS FINAL t_f ($\lambda = 1.0$)

On utilise HAMPATH pour une continuation sur t_f entre $T_{\min} + \varepsilon$ et $2T_{\min}$.
 \hookrightarrow asymptote horizontale sur le graphe du contraste. 99% de la solution optimale est obtenue à partir de $t_f = 1.3T_{\min}$.

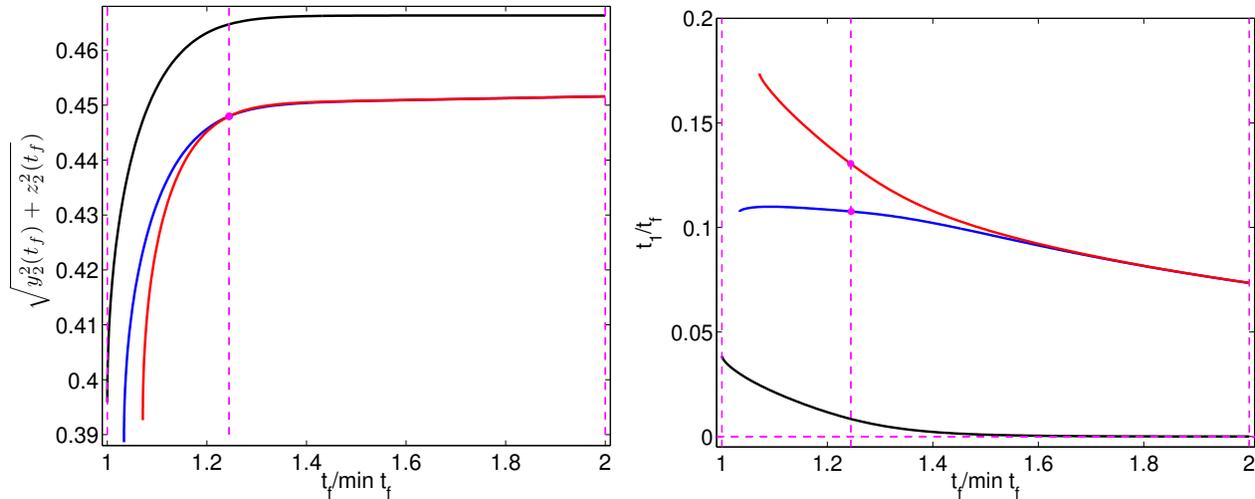


Figure 12: Meilleure solution en noir. (GAUCHE) Contraste en fonction de t_f/T_{\min} . (DROITE) Instant de commutation normalisé (*i.e.* t_1/t_f) en fonction de t_f/T_{\min} .

Théorème 4 (CS2). Soit B^+S une extrémale sur $[0, t_f]$, satisfaisant les conditions de transversalité, formée par un arc bang avec $u = 2\pi$ sur $[0, t_1]$ suivi d'un arc singulier sur $[t_1, t_f]$. Supposons que l'arc singulier satisfasse des hypothèses génériques. Alors l'extrémale B^+S est optimale sur $[0, t_f]$ dans un voisinage tubulaire de l'arc S fixé, s'il n'existe aucun point conjugué sur $[t_1, t_f]$.

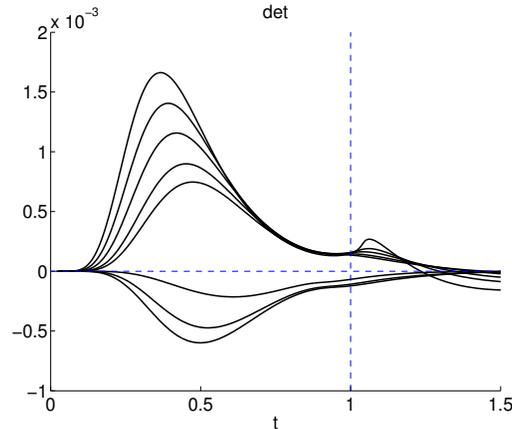


Figure 13: **Cas du sang.** Déterminant en relation avec les champs de Jacobi utilisés pour le calcul des conditions du deuxième ordre. Les courbes sont paramétrisées afin que le temps final soit toujours égal à 1.

SOLUTION POUR LE CAS LIMITE : t_f PROCHE DE T_{\min}

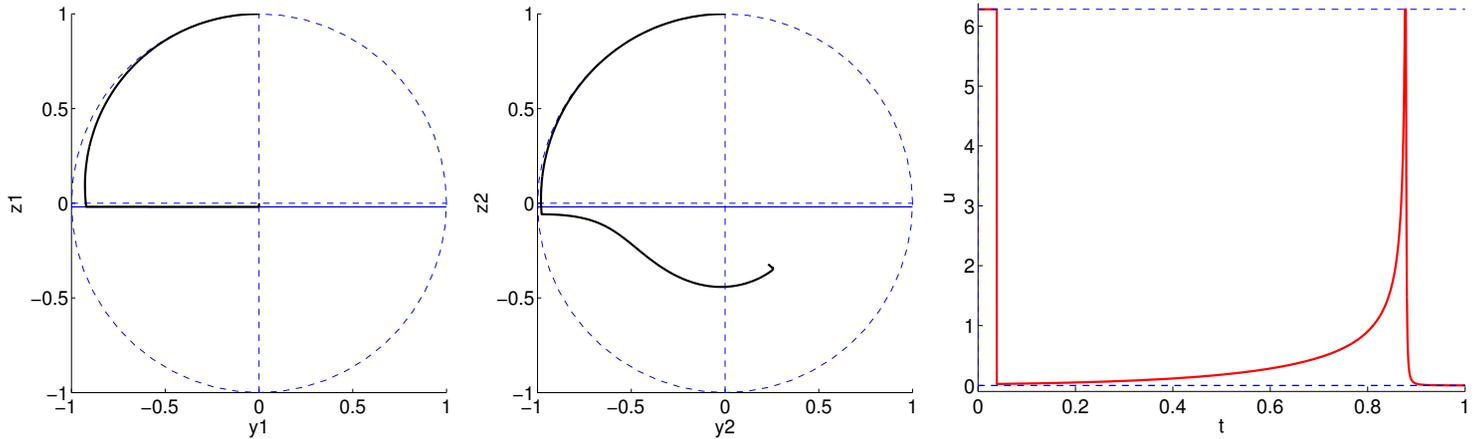
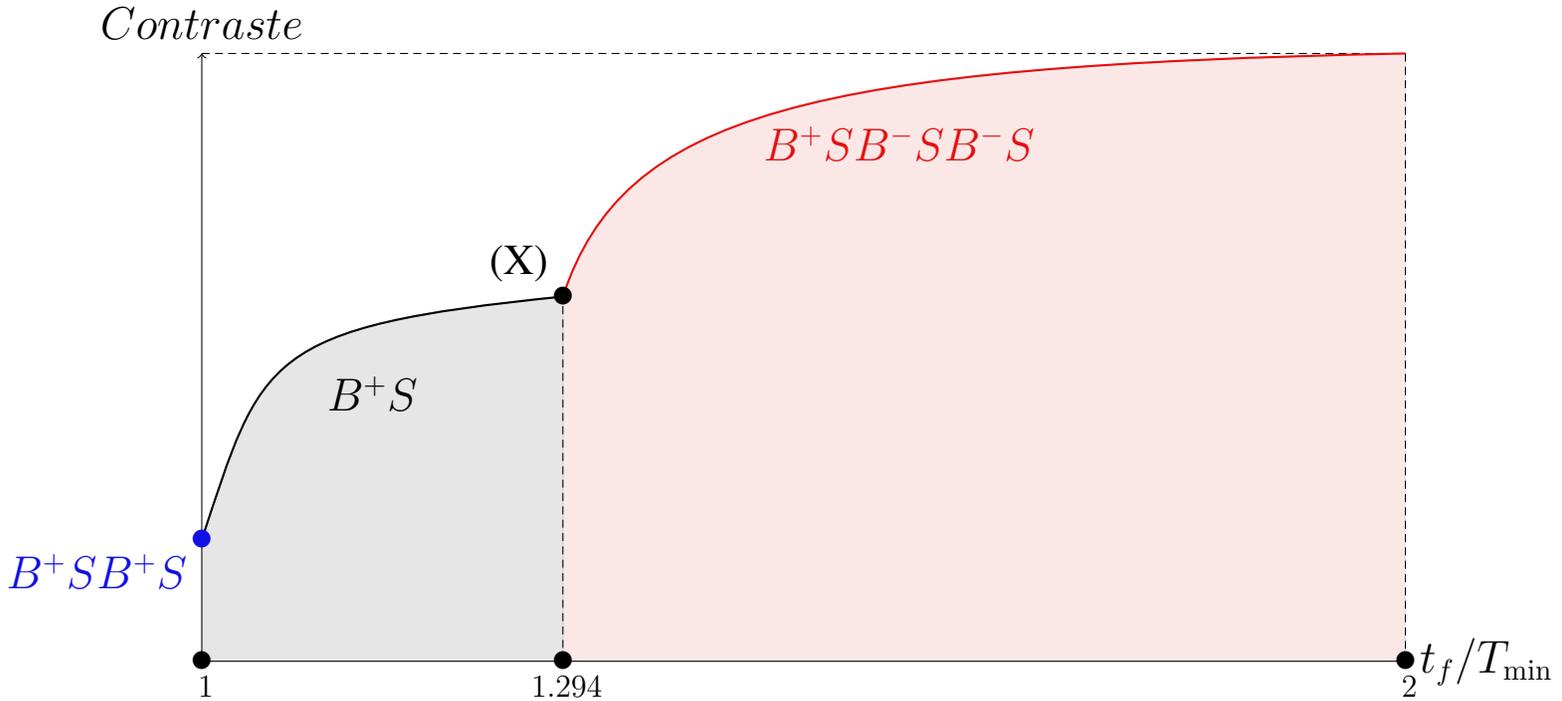


Figure 14: Meilleure solution pour $t_f = 1.000004 \times \min t_f$.

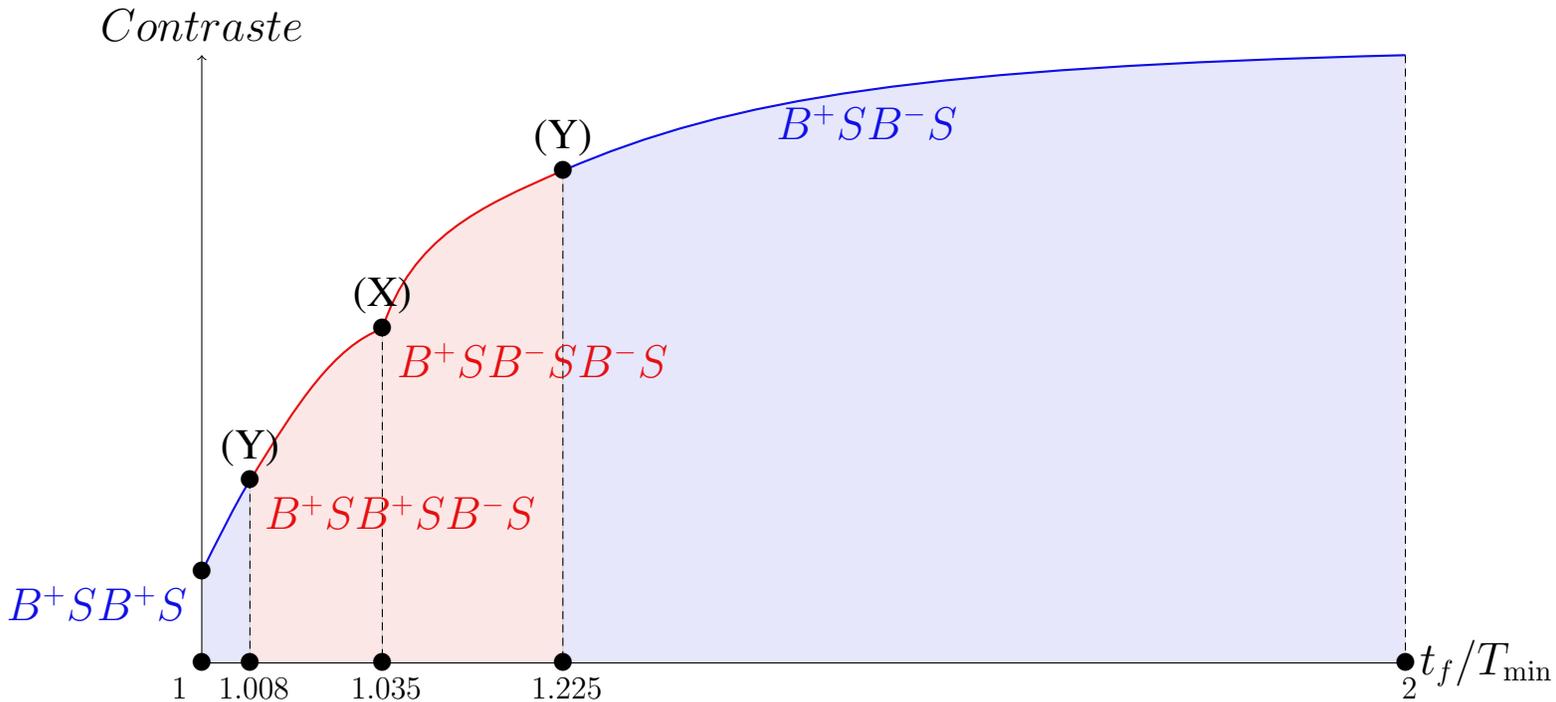
SYNTHÈSE SOUS-OPTIMALE : CAS DU SANG



Leg. (X) : situation de nature globale (deux branches se croisent).

Remarque 4. Borne sup avec LMI : 0.57, max trouvé ici 0.5 (pour $2T_{\min}$).

SYNTHÈSE SOUS-OPTIMALE : CAS DU FLUIDE



Leg. (X) : situation de nature globale (deux branches se croisent).

(Y) : notion d'homotopie étendue (changement de structure $S \leftrightarrow SBS$ et donc d'espace de définition de la fonction homotopique).

Remarque 5. Borne sup avec LMI : 0.85, max trouvé ici 0.8 (pour $2T_{\min}$).

Synthèse.

- Réalisation d'un code performant associant **tir simple**, **tir multiple**, **méthodes homotopiques** dans les deux cas et **calcul des champs de Jacobi**. Validé sur un problème de transfert orbital dont les solutions sont bang-bang.
- Appliqué au problème de contraste, la régularisation permet la **détection de structure complexe** (BS, BSBS). **L'homotopie étendue** fait apparaître des structures encore plus riches de type BSBSBS. Une synthèse sous-optimale très complète est donnée par la comparaison des différentes branches.
- Des travaux (non présentés) sur les équations de Lindblad ont fourni une **synthèse globale** (calcul des lieux conjugués et de coupure) pour des cas réduits en deux dimensions.

Perspectives.

- Partir à la recherche de la synthèse globale pour le problème de contraste. Deux pistes : améliorer les résultats LMI et étudier le problème à t_f libre (*i.e.* $H = 0$).
- Deux publications sont en cours sur la recherche des lieux conjugués pour le problème du corps solide, en analogie avec les travaux sur les équations de Lindblad.

- Geometric Numerical Methods and Results in the Control Imaging Problem in Nuclear Magnetic Resonance. *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences (M3AS)* to appear (2012). (avec Bonnard, B)
- Differential pathfollowing for regular optimal control problems. *Optim. Methods Softw.* 27 (2012), no. 2, 177-196. (avec Caillau J.-B.; Gergaud, J.)
- Geometric optimal control of the contrast imaging problem in Nuclear Magnetic Resonance. *IEEE transactions on automatic and control*, (2011). (avec Bonnard, B.; Glaser, S. J.; Lapert, M.; Sugny D.; Zhang Y.)
- Energy minimization problem in two-level dissipative quantum control: meridian case. *Journal of Mathematical Sciences*, to appear (2011). (avec Bonnard, B.; Shcherbakova, N.)
- Energy minimization in two-level dissipative quantum control: The integrable case. *Discrete Conti. Dyn. Syst. suppl.* (2011), 198-208. Proceedings of 8th AIMS Conference on Dynamical Systems, Differential Equations and Applications, Dresden, May 2010. (avec Bonnard, B.; Caillau, J.-B.)
- The energy minimization problem for two-level dissipative quantum systems *J. Math. Phys.* **51**, 092705 (2010), 1–44. (avec Bonnard, B.; Shcherbakova, N.; Sugny, D.)