



HAL
open science

Contrôle optimal géométrique : méthodes homotopiques et applications

Olivier Cots

► **To cite this version:**

Olivier Cots. Contrôle optimal géométrique : méthodes homotopiques et applications. Optimisation et contrôle [math.OC]. Université de Bourgogne, 2012. Français. NNT : 2012DIJOS008 . tel-00742927v3

HAL Id: tel-00742927

<https://theses.hal.science/tel-00742927v3>

Submitted on 1 Feb 2013 (v3), last revised 21 Feb 2013 (v4)

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



UNIVERSITÉ DE BOURGOGNE - DIJON
ÉCOLE DOCTORALE CARNOT

UFR des Sciences et des Techniques
Institut de Mathématiques de Bourgogne

THÈSE

pour obtenir le titre de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ DE BOURGOGNE

Discipline : Mathématiques Appliquées

par

Olivier COTS

CONTRÔLE OPTIMAL GÉOMÉTRIQUE : MÉTHODES
HOMOTOPIQUES ET APPLICATIONS

Soutenue publiquement le 20 septembre 2012 devant le jury composé de :

<i>Président</i>	J.-M. Coron	-	PR, Univ. Paris VI & CNRS
<i>Rapporteurs</i>	U. Boscain	-	DR, Ecole Polytechnique & CNRS
	E. Trélat	-	PR, Univ. Paris VI & CNRS
<i>Examineurs</i>	B. Bonnard	-	PR, Univ. Bourgogne & CNRS
	P. Martinon	-	CR, INRIA
	M. Mirrahimi	-	DR, INRIA
<i>Directeurs</i>	J.-B. Caillau	-	PR, Univ. Bourgogne & CNRS
	J. Gergaud	-	PR, Univ. Toulouse & CNRS

À ma mère

“Je ne suis ni pour, ni contre, bien au contraire.”

Coluche

“Un bon contrôle, c’est la moitié d’un but.”

Michel Platini

Table des matières

Introduction	v
Remerciements	xi
1 Contrôle optimal géométrique	1
1.1 Principe du Maximum de Pontryagin	1
1.2 Conditions nécessaires ou suffisantes du deuxième ordre	7
1.2.1 Conditions dans le cas d'un Hamiltonien régulier lisse	7
1.2.2 Conditions pour un problème temps minimal affine mono-entrée	13
2 Méthodes algorithmiques pour le contrôle optimal	17
2.1 Suivi de chemin différentiel	17
2.2 Le package HAMPATH	22
2.2.1 Le Hamiltonien maximisé	23
2.2.2 Présentation des méthodes de tir	25
2.2.3 Présentation des méthodes homotopiques	35
2.2.4 Synthèse	38
2.3 Exemples de validation	40
3 Application au problème de contraste en imagerie médicale	51
3.1 Présentation du problème de contraste	51
3.2 Le problème à un seul spin en temps minimal	58
3.3 Résultat sur le flot singulier du problème de contraste	63
3.4 Régularisation du problème de contraste	67
3.5 Étude du cas : sang désoxygéné/oxygéné	72
3.6 Étude du cas : liquide cérébrospinal/eau	79
3.7 Synthèse des résultats	84
4 Minimisation de l'énergie en contrôle quantique	89
4.1 Extrémales normales	90
4.2 Intégration du flot	91
4.3 Lieux conjugué et de coupure	92
Conclusion	99
A Résultats supplémentaires pour le problème de contraste	103
Bibliographie	123

Introduction

Contexte de l'étude. La matière de ce travail est l'utilisation du contrôle optimal dans le cadre de la mécanique céleste dans un premier temps, puis de la mécanique quantique. Plus précisément, on s'intéresse au contrôle optimal du point de vue géométrique, en se basant à la fois sur le principe du maximum de Pontryagin, qui nous donne des conditions nécessaires du premier ordre, et sur les notions de point conjugué et point de coupure, donnant des conditions d'optimalité nécessaires ou suffisantes au deuxième ordre. Cette association permet d'analyser qualitativement les propriétés caractéristiques des extrémales solutions du système hamiltonien afférent au problème et vérifier *a posteriori* l'optimalité des trajectoires associées. En outre, nous voulons que les applications guident les réflexions et les chemins à suivre pour cette étude. Tout d'abord, nous reprenons le problème de transfert de satellite autour de la Terre, tel qu'il fut retenu à l'origine par le Centre National d'Études Spatiales, cf. Réfs. [Cai00, Gef97] (transfert à temps minimal). Celui-ci est bien entendu classique en contrôle optimal, dont l'histoire est indissociablement liée à la conquête spatiale. On s'intéresse ici plus particulièrement au transfert à consommation minimale.

Par la suite, de manière plus approfondie, on se focalise sur le contrôle quantique, cf. Réfs. [BCC11, BCS11, BCSS10], dont l'essor récent rend compte de la richesse de ce sujet, voir par exemple Réf. [KGB05]. La formulation à la base de ce travail, vient des équations de Lindblad Réfs. [GKS76, Lin76] régissant la dynamique d'un système quantique à 2 niveaux d'énergie dans un milieu dissipatif,

$$\begin{aligned}\dot{x} &= -\Gamma x + u_2 z \\ \dot{y} &= -\Gamma y - u_1 z \\ \dot{z} &= \gamma_- - \gamma_+ z + u_1 y - u_2 x.\end{aligned}\tag{1}$$

où $q = (x, y, z)$ est l'état du système, $\Lambda = (\Gamma, \gamma_+, \gamma_-)$ est l'ensemble des paramètres de dissipation satisfaisant les contraintes $2\Gamma \geq \gamma_+ \geq |\gamma_-|$. On peut noter que ces équations correspondent à une normalisation près, aux équations de Bloch décrivant le contrôle de particules de spin 1/2 en Résonance Magnétique Nucléaire, lorsque le terme de detuning est nul Réf. [Lev01]. Le contrôle est une fonction complexe $u = u_1 + iu_2$ associée au contrôle physique qui est un champ électromagnétique. La boule de Bloch $|q| \leq 1$ est l'espace physique dans lequel vit l'état et est invariante pour la dynamique. Le problème de contrôle optimal considéré est de déplacer l'état de q_0 vers q_1 (tous deux fixés), tout en minimisant l'énergie : $\min \int_0^{t_f} (u_1^2(t) + u_2^2(t)) dt$, en un temps final t_f fixé. On cherche à étudier le comportement des solutions, des lieux conjugué et de coupure en fonction

des paramètres de dissipation. Calculer ces lieux est équivalent à résoudre l'équation de Hamilton-Jacobi-Bellman.

Un deuxième intérêt est porté sur l'étude du problème de contraste en imagerie médicale, *cf.* Réfs. [BC12, BCG⁺12]. Le système physique étudié est composé de deux différents types de particules, baignant dans un même environnement. On peut étudier par exemple le cas où sont mélangés du sang oxygéné et du sang non oxygéné. On applique le contrôle qui après certains traitements numériques nous donne une image en niveaux de gris. Un niveau de gris pour le sang oxygéné et un autre pour le sang non oxygéné. Le but étant alors de maximiser le contraste de l'image afin de pouvoir distinguer les régions délimitées par les deux types de particules. Afin de maximiser le contraste, on applique un champ laser qui agit sur les particules. Chacune réagissant différemment suivant ses propres caractéristiques. Dans ce problème nous avons donc deux systèmes à trois dimensions issus des équations de Bloch, couplés par un même contrôle. Cependant, grâce aux symétries, il est possible de réduire chaque système en dimension deux avec un contrôle scalaire. Le problème de maximisation du contraste $\max |q_2(t_f)|^2 = (y_2^2(t_f) + z_2^2(t_f))$ est alors gouverné par les équations suivantes

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

avec pour conditions initiales $q_1(0) = (0, 1) = q_2(0)$ et finales $q_1(t_f) = (0, 0)$. Les états des deux spins $q_i = (y_i, z_i)$, sont tels que $|q_i| \leq 1$, $i = 1, 2$, les paramètres de dissipation sont γ_i et Γ_i , $i = 1, 2$, le contrôle est borné, $|u| \leq 2\pi$ et le temps de transfert t_f est fixé. Le Hamiltonien du problème 2D est alors affine en le contrôle. Ceci implique que les solutions peuvent être composées d'arcs bangs (le contrôle est saturant), et d'arcs singuliers (le contrôle n'est pas saturant). On cherche à savoir ici quelles sont les structures possibles des contrôles optimaux en fonction des paramètres, de manière qualitative et numérique. Cette étude complète les travaux Réf. [?], où l'on peut retrouver une description détaillée des principes physiques et expérimentaux impliqués.

Il est clair que ces nombreuses applications peuvent conduire à plusieurs classes de solutions, les contrôles optimaux associés pouvant être lisses, continus par morceaux ou bien encore de norme constante par morceaux. De surcroît, la diversité des études liées aux conditions du premier et second ordre, ne doit pas nous amener à multiplier les efforts numériques et l'on s'attache à réaliser un code performant tel que les fonctions implémentées soient suffisamment générales pour traiter de nombreux cas. Le fil conducteur de ce manuscrit réside dans les méthodes de tir et homotopique que l'on veut utiliser. L'une des premières parties de ce manuscrit, plutôt algorithmique, porte donc sur la réalisation d'un programme appelé HAMPATH, Réf. [CCG10], qui regroupe mé-

thodes homotopiques différentielles et conditions du deuxième ordre. Il fait tout d'abord suite aux thèses de T. Haberkon et P. Martinon, *cf.* Réf. [Hab04, Mar05], dirigées par J. Gergaud, qui introduisent les méthodes homotopiques discrète, simpliciale et différentielle pour la résolution de problèmes de mécanique spatiale. Le code HAMPATH fait de plus suite aux travaux de B. Bonnard, J-B. Caillau et E. Trélat en élargissant les possibilités du package *Cotcot*, voir Réfs. [BCT07a, BCT05], conçu pour l'étude de flots hamiltoniens lisses et le calcul des conditions d'optimalités du deuxième ordre associées.

Organisation du document. Ce manuscrit est divisé en quatre chapitres relativement indépendants. Le premier présente les outils théoriques majeurs sur lesquels se basent les conceptions à la fois analytique et numérique des parties suivantes. Ce chapitre est lui-même décomposé en deux sections dont la première introduit le principe fondamental et quelques unes de ces conséquences, en contrôle optimal, à savoir le principe du maximum de Pontryagin. La seconde section est consacrée aux conditions du deuxième ordre où l'on définit la notion de point conjugué. Au deuxième chapitre, on regroupe tous les outils algorithmiques développés durant ce travail, appliqués avec succès aussi bien pour les problèmes de mécanique céleste que quantique, et qui forment le code HAMPATH. On présente le cadre théorique et algorithmique des méthodes homotopiques différentielles de ce code, en lien avec les conditions du deuxième ordre. La fin de ce chapitre est consacrée aux tests de validation sur deux exemples non académiques. Nous arrivons à la deuxième partie du manuscrit qui traite des applications en mécanique quantique. Au chapitre trois, on retrouve tout d'abord la présentation du problème de contraste. L'étude d'un sous problème nous montre par ailleurs l'importance dans ce système, du flot singulier. Ceci guide alors la fin du chapitre qui est centré sur la résolution du problème dans deux cas particuliers. Une synthèse sous-optimale non triviale est donnée pour chacun des cas, améliorant sensiblement les résultats jusqu'alors connus. Pour finir, le quatrième et dernier chapitre met l'accent sur l'optimalité globale en contrôle optimal. On s'intéresse au flot du système régit par les équations de Lindblad (1), en dimension trois, que l'on restreint en dimension deux, et l'on donne une synthèse cohérente des lieux conjugué et de coupure pour ce cas. On peut ainsi à partir d'un point fixé, connaître l'instant et le lieu où chaque extrémale, solution du système hamiltonien associé, perd son caractère optimal, globalement ou même localement.

Idées directrices. Le fil conducteur de cette étude est donc l'utilisation des méthodes homotopiques et l'application des conditions nécessaires ou suffisantes du deuxième ordre, dont certaines connexions entre les deux sont explicitées dans la première section du chapitre deux. La motivation première a donc été de réaliser un code performant et qui soit disponible, donc simple d'utilisation. Ce programme doit contenir un ensemble de fonctions permettant la résolution de problèmes de contrôle optimal suffisamment généraux (*i.e.* dont les contrôles optimaux peuvent être lisses, bang-bang,

bang-singulier. . .). La principale caractéristique vient de la méthode homotopique différentielle originale basée sur l'expression du Hamiltonien, d'où le nom HAMPATH. On doit de même pouvoir calculer les champs de Jacobi continus ou discontinus, nécessaires à l'application des conditions du deuxième ordre. L'utilisation de ce code dans de nombreuses situations légitime naturellement la démarche. En ce qui concerne le problème régi par les équations de Lindblad, il a la propriété d'être intrégrable pour certaines valeurs des paramètres. Dans ce cas, de nombreux résultats analytiques sont disponibles et il est donc naturel d'étudier la déformation en fonction des paramètres, des solutions optimales. De même dans un cas particulier, étudier l'optimalité locale et globale des extrémales de ce système revient à analyser une métrique sur \mathbf{S}^2 déjà bien étudiée. Il est donc naturel aussi de chercher à comprendre la déformation entraînée par les paramètres, à partir des résultats existants. Enfin pour le problème de contraste, une étude préliminaire nous permet de mettre en évidence tout d'abord les structures potentielles complexes des solutions optimales, mais aussi les difficultés pour la résolution suite aux symétries du problème. La présence d'arcs bang et singulier dans les contrôles optimaux nous mène à utiliser des techniques de régularisation et à utiliser des méthodes de tir multiple pour la résolution. On montre qu'avec l'analyse géométrique et les outils numériques développés, il est possible de donner une synthèse sous-optimale bien plus complète que les résultats déjà connus et plus proche de la synthèse optimale.

Collaborations. Le Conseil Régional de Bourgogne est à l'origine du financement (contrat Faber no. 2009-160E-160-CE-160T) de cette étude, effectué au sein de l'équipe Équations Différentielles et Contrôle au laboratoire Carnot de l'Institut Mathématiques de Bourgogne. Le travail sur le problème de contraste aura été réalisé en collaboration avec l'équipe de S.J. Glaser de l'Université de Munich. Enfin durant cette thèse, un rattachement à l'équipe Algorithmes Parallèles et Optimisation lié à l'activité Informatique Numérique de l'IRIT-ENSEEIH est à la base du projet HAMPATH et des applications en mécanique spatiale.

Contributions. J'ai contribué durant cette thèse à la réalisation de cinq articles parus ou destinés à des journaux internationaux, un proceeding et trois présentations dans des conférences internationales. On donne ici les références aux six articles.

- 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 Caillaud J.-B. ; Gergaud, J.)
- Geometric optimal control of the contrast imaging problem in Nuclear Magnetic Resonance. *IEEE transactions on automatic and control*, 57 (2012), no. 8, 1957-1969. (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*, 145 (2011), no. 5, to appear. (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.; Caillaud, 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.)

Remerciements

Tout d'abord, je tiens à remercier mes directeurs de thèse, Jean-Baptiste Caillau et Joseph Gergaud, pour m'avoir fait découvrir, dès le stage de master 2, le monde passionnant de la recherche universitaire au travers de ce domaine si riche des Mathématiques Appliquées qu'est le contrôle optimal. Ils ont grandement contribué à développer mon envie de poursuivre dans cette voie là, par leur générosité dans le suivi, l'encadrement et la confiance qu'ils m'ont accordée. Pour ces raisons et d'autres encore, je leur suis très reconnaissant. Cette thèse n'aurait pas eu lieu sans l'aval et l'apport du Conseil Régional de Bourgogne, c'est pourquoi je leur exprime ma gratitude. J'aimerais également remercier Bernard Bonnard pour son humanité, marquée par son accueil chaleureux autour d'un marc. J'ai profité de sa grande expérience, de ses critiques avisées et de son extrême dynamisme qui pousse à l'effort. J'ai eu la chance de pouvoir collaborer avec lui à plusieurs reprises, pour son aide et son soutien je lui suis redevable. Mes remerciements vont aussi à Nataliya Shcherbakova qui m'aura beaucoup m'apporté en cette troisième et dernière année de thèse. Merci pour ta disponibilité accompagnée d'une grande patience à mon égard.

Je souhaite remercier M. Ugo Boscain et M. Emmanuel Trélat pour avoir accepté d'être rapporteurs de ce travail en tant que spécialistes du contrôle. Je leur sais gré de l'attention qu'ils ont portée à la lecture de ce manuscrit ainsi que des remarques qu'ils ont formulées à ce propos. Je remercie de même messieurs Jean-Michel Coron, Pierre Martinon et Mazyar Mirrahimi pour avoir bien voulu faire partie de mon jury de thèse.

Merci à tous les membres de l'équipe APO qui m'ont accueilli au sein de l'IRIT. J'adresse plus particulièrement mes remerciements à Ronan Guivarch et Bernard Thiesse avec qui j'ai partagé de nombreuses heures d'enseignement. Je ne peux oublier ni Sylvie ni Sylvie pour leur extrême gentillesse et leur constante bonne humeur. Merci aux doctorants et stagiaires des deuxième et troisième étages pour les bons moments passés en votre compagnie, votre aide parfois, ainsi qu'à l'ensemble de mes co-bureaux de Dijon et Toulouse, notamment Sandrine, Jordan, Anne et Natasha, pour la bonne ambiance de travail.

Je tiens également à remercier mes amis proches, tout particulièrement Lilian et Guillaume pour leur précieux soutien. Merci à ma mère, mes frères BenJ et Guillaume, ma grand-mère et Jean-Marc pour tout ce que vous avez fait pour moi. Mon dernier mot est à l'adresse de Séverine et mon petit Léon. Merci pour ton aide, pour vos sourires, je vous embrasse.

CHAPITRE 1

Contrôle optimal géométrique

Dans ce chapitre est introduit la problématique du contrôle optimal. De nombreuses références traitent du vaste sujet qu'est le contrôle optimal. Nous pouvons citer Réfs. [AS04, BS12, Jur97, PBGM83, Sus99] parmi les principales. On s'intéresse ici à un problème de contrôle optimal formulé de manière générale pour lequel on donne une condition nécessaire du premier ordre ainsi que des conditions nécessaires ou suffisantes du second ordre d'optimalité locale. Ce chapitre s'inspire principalement des chapitres 10, 20 et 21 de Réf. [AS04] et du premier de Réf. [BS12].

1.1 Principe du Maximum de Pontryagin [AS04, BS12]

Nous présentons dans cette section, le Principe du Maximum de Pontryagin. Ce principe nous donne une condition nécessaire du premier ordre, d'optimalité locale, que doit vérifier toute solution potentielle d'un problème de contrôle optimal. Considérons tout d'abord un système de contrôle autonome s'écrivant en coordonnées locales

$$\dot{x}(t) = f(x(t), u(t)), \quad (1.1)$$

où $f : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^n$ est C^1 . Les contrôles $u(\cdot)$ sont des fonctions mesurables bornées, à valeur dans un domaine quelconque $\mathbf{U} \subset \mathbb{R}^m$. Soient M_0 et M_1 deux sous-variétés différentiables de \mathbb{R}^n définissant les conditions aux deux bouts. Enfin on définit le coût d'un contrôle u sur $[0, T]$ par

$$C(T, u) := g(T, x(T)) + \int_0^T f^0(x(s), u(s)) ds, \quad (1.2)$$

avec $f^0 : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}$ et $g : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, toutes deux C^1 , et $x(\cdot)$ la trajectoire solution de (1.1) associée au contrôle $u(\cdot)$.

On considère le problème de contrôle optimal suivant : déterminer une trajectoire reliant M_0 à M_1 et minimisant le coût. Le temps final T peut être fixé ou non.

Théorème 1.1 (Principe du Maximum de Pontryagin). *Si le contrôle $u \in \mathcal{U}$ est optimal sur $[0, T]$, alors il existe une application $p : [0, T] \rightarrow \mathbb{R}^n$ absolument continue et une*

constante $p^0 \leq 0$, $(p, p^0) \neq 0$, telles que pour presque tout $t \in [0, T]$

$$\begin{aligned} \dot{x}(t) &= \frac{\partial H}{\partial p}(x(t), p(t), p^0, u(t)), \\ \dot{p}(t) &= -\frac{\partial H}{\partial x}(x(t), p(t), p^0, u(t)), \\ H(x(t), p(t), p^0, u(t)) &= \max_{u \in \mathbf{U}} H(x, p, p^0, u), \end{aligned} \quad (1.3)$$

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

Si le temps final pour joindre la cible M_1 est libre et si u est continu en T , on a la condition au temps final T

$$H(x(T), p(T), p^0, u(T)) = -p^0 \frac{\partial g}{\partial t}(T, x(T)), \quad p.p. \ t. \quad (1.4)$$

Enfin le vecteur adjoint p peut être choisi d'après les conditions de transversalité aux extrémités suivantes

$$p(0) \perp T_{x(0)} M_0, \quad p(T) - p^0 \frac{\partial g}{\partial x}(T, x(T)) \perp T_{x(T)} M_1. \quad (1.5)$$

Puisque le problème de contrôle est autonome, i.e. f et f^0 ne dépendent pas de t , le pseudo-Hamiltonien H ne dépend pas de t et on a

$$\forall t \in [0, T], \quad H(x(t), p(t), p^0, u(t)) = Cste, \quad p.p. \ t.$$

Définition 1.1. Une *extrémale* du problème de contrôle optimal est un quadruplet $(x(\cdot), p(\cdot), p^0, u(\cdot))$ solution des équations (1.3).

Définissons le système augmenté

$$\begin{aligned} \dot{x}(t) &= f(x(t), u(t)), \\ \dot{x}^0(t) &= f^0(x(t), u(t)), \end{aligned} \quad (1.6)$$

et notons $\tilde{x} := (x^0, x)$ l'état et $\tilde{f} := (f^0, f)$ le système, augmentés. Supposons $g \equiv 0$, le problème de contrôle optimal revient alors à trouver une trajectoire reliant M_0 à M_1 et minimisant $x^0(T)$ avec $x^0(0) = 0$. Le PMP est fondé sur la remarque géométrique que nécessairement $\tilde{x}(T) \in \partial \tilde{A}(\tilde{x}_0, T)$, où $\tilde{A}(\tilde{x}_0, t) := \{\tilde{x}(t, \tilde{x}_0, u), u \text{ admissible sur } [0, t]\}$ est l'ensemble accessible depuis \tilde{x}_0 , en temps t , par les contrôles admissibles sur $[0, t]$.

On peut de plus définir un véritable système hamiltonien ainsi que son gradient symplectique (ou champ de vecteurs hamiltonien) sous certaines conditions, d'après le corollaire suivant.

Corollaire 1.2. Si $H(x, p) := \max_{u \in \mathbf{U}} H(x, p, p^0, u)$ est défini et lisse sur un voisinage de l'extrémale $z := (x, p) : [0, T] \rightarrow \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$, alors pour presque tout $t \in [0, T]$

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

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

Définition 1.2. Une extrémale $(x(\cdot), p(\cdot), p^0, u(\cdot))$ solution de (1.3) est dite *anormale* si $p^0 = 0$ et *normale* dans le cas contraire. Une extrémale est dite *singulière* si $\partial_u H = 0$. Elle est dite *régulière* sinon. Si le Hamiltonien est nul le long de l'extrémale alors elle est appelée *exceptionnelle*.

Calcul des contrôles singuliers

Le Principe du Maximum de Pontryagin nous donne une condition de maximisation du Hamiltonien. Dans le cas où le domaine \mathbf{U} est une variété sans bord (*i.e.* il n'y a pas de contrainte sur u), la condition de maximisation dans (1.3) est remplacée par $\partial_u H = 0$. Dans ce cas, la condition définie ci-après est nécessaire pour que l'extrémale soit optimale sur $[0, T]$.

Proposition 1.1. Si la trajectoire $x(\cdot)$ associée au contrôle $u(\cdot)$, non contraint, est optimale sur $[0, T]$ 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

$$\frac{\partial^2 H}{\partial u^2}(x(t), p^0, p(t), u(t)) \cdot (v, v) \leq 0, \quad \forall v \in \mathbb{R}^m, \quad \forall t \in [0, T]. \quad (1.7)$$

Définition 1.3. On appelle *système de contrôle affine* tout système de la forme

$$\dot{x}(t) = F_0(x(t)) + \sum_{i=1}^m u_i(t) F_i(x(t)).$$

Le champ de vecteurs F_0 est appelé *dérive* et $D = \{F_1, \dots, F_m\}$ est appelée la *distribution contrôlée*.

La proposition précédente n'est pas significative dans le cas affine, où l'on a $\partial_{uu} H \equiv 0$. On introduit donc la définition suivante.

Définition 1.4. Une extrémale $(x(\cdot), p(\cdot), p^0, u(\cdot))$ est dite *totalelement singulière* si

$$\frac{\partial^2 H}{\partial u^2}(x(t), p^0, p(t), u(t)) = 0, \quad \forall t \in [0, T].$$

On dit que l'on se trouve dans un *cas régulier* si l'équation (1.7) est stricte le long de l'extrémale.

Dans le cas totalement singulier, pour un système affine par exemple, on a alors la condition nécessaire d'optimalité suivante.

Proposition 1.2. *Si la trajectoire $x(\cdot)$ associée au contrôle $u(\cdot)$, non contraint, est optimale sur $[0, T]$ pour la topologie L^∞ , et si l'extrémale associée est totalement singulière, alors la condition de Goh est vérifiée le long de l'extrémale, c'est à dire*

$$\left\{ \frac{\partial H}{\partial u_i}, \frac{\partial H}{\partial u_j} \right\} = 0, \quad (1.8)$$

le long de l'extrémale, où $\{.,.\}$ est le crochet de Poisson sur T^*X , défini ci-après. De plus, la condition de Legendre généralisée est vérifiée le long de l'extrémale, c'est à dire

$$\frac{\partial}{\partial u} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \frac{\partial H}{\partial u}(x(t), p^0, p(t), u(t)).(v, v) \geq 0, \quad \forall v \in \mathbb{R}^m, \quad \forall t \in [0, T]. \quad (1.9)$$

Définition 1.5. Soit X une variété différentiable ouverte de \mathbb{R}^n , $T_x X$, $T_x^* X$ les espaces tangent et cotangent. Si F, G sont deux champs de vecteurs lisses, le *crochet de Lie* de F, G est donné par la formule suivante.

$$[F, G] = \frac{\partial F}{\partial x}(x)G(x) - \frac{\partial G}{\partial x}(x)F(x),$$

alors que le *crochet de Poisson* de deux Hamiltoniens lisses H_1, H_2 est défini par $\{H_1, H_2\}(z) = dH_1(z) \cdot \vec{H}_2(z)$, $z = (x, p) \in T^*X$. Si l'on note H_F, H_G les *relèvements hamiltoniens* de F, G , i.e. $H_F := \langle p, F(x) \rangle$, $H_G := \langle p, G(x) \rangle$, on a alors la relation $\{H_F, H_G\} = \langle p, [F, G](x) \rangle$.

On s'intéresse maintenant au calcul du contrôle $u(\cdot)$ singulier, pour lequel on est amené à résoudre $\partial_u H = 0$. On présente la démarche dans deux cas. On considère d'abord le cas régulier puis le cas d'un système affine.

Calcul de $u(\cdot)$ pour le cas régulier : On considère un Hamiltonien de la forme $H = \langle p, f(x, u) \rangle$. On suppose donc ici que la matrice Hessienne $\partial_{u_i u_j} H$ est de rang plein m en chaque point $z = (x, p)$. La condition de Legendre (1.7) est stricte. Dans ce cas, en appliquant le théorème des fonctions implicites pour résoudre $\partial_u H = 0$, on obtient le contrôle u comme une fonction lisse $\hat{u}(z)$ et le contrôle référence est $u(t) = \hat{u}(z(t))$. On écrit $\hat{H}(x, p) = \langle p, f(x, \hat{u}(x, p)) \rangle$, ce qui définit le *Hamiltonien vrai lisse*, dont les solutions donnent les extrémales singulières puisque $\partial_x H = \partial_x \hat{H}$, $\partial_p H = \partial_p \hat{H}$ et $\partial_u H = 0$.

Calcul de $u(\cdot)$ pour un système affine : On considère ici un système affine $\dot{x} = F_0 + \sum_{i=1}^m u_i F_i$, $x \in \mathbb{R}^n$, dont les extrémales solutions sont donc totalement singulières. On ne peut pas utiliser la méthode précédente. Cependant on peut toujours calculer le contrôle u à l'aide des crochets de Poisson. La relation $\partial_u H = 0$ implique les conditions

$$H_i(z(t)) = 0; \quad i = 1, \dots, m$$

où les $H_i = \langle p, F_i \rangle$ sont les relèvements hamiltoniens. La dérivée par rapport au temps t de H_i le long d'une extrémale solution de H est donnée par le crochet de Poisson $\{H, H_i\}$. Ainsi en utilisant cette règle, on obtient que

$$L(z(t)) + O(z(t))u = 0$$

où L est la matrice $m \times 1$ ($\{H_i, H_0\}(z)$) et O est la matrice $m \times m$ ($\{H_i, H_j\}(z)$). Puisque O est antisymétrique, on a deux cas. Si la matrice est inversible (donc m de dimension paire), alors le contrôle est donné par $\hat{u}(z) = -O^{-1}(z)L(z)$. Sinon on raisonne de même en considérant une matrice augmentée. Dans le cas particulier où $m = 1$ (*i.e.* le cas mono-entrée), on a simplement la condition $H_1 = 0$ puis en dérivant par rapport au temps, $\dot{H}_1 = \{H_0, H_1\} = 0$ et la matrice O est nulle. Enfin en dérivant une seconde fois, on obtient $\ddot{H}_1 = \{H_0, \{H_0, H_1\}\} + u_1 \{\{H_1, H_0\}, H_1\} = 0$. On retrouve u_1 si $\{\{H_1, H_0\}, H_1\} \neq 0$. De plus, dans le cas affine mono-entrée, la condition de Goh (1.8) est toujours vérifiée. Et la condition de Legendre généralisée (1.9) se trouve être

$$\frac{\partial}{\partial u} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \frac{\partial H}{\partial u} = \frac{\partial}{\partial u} \ddot{H}_1 = \{\{H_1, H_0\}, H_1\} \geq 0.$$

La condition doit donc être stricte pour que le contrôle soit optimal et puisse être calculé ainsi.

Classification des extrémales d'un système affine mono-entrée [Kup87]

Les systèmes affines mono-entrée sont très intéressants car on peut avoir une classification précise des extrémales solutions. Ils seront de plus repris dans la section suivante car après le cas régulier, c'est l'un des premiers systèmes pour lequel on peut donner des conditions nécessaires ou suffisantes du second ordre calculables numériquement. Enfin, l'étude d'un système affine mono-entrée est réalisée dans le chapitre 3.

On considère donc un système affine mono-entrée de la forme $\dot{x} = F_0(x) + uF_1(x)$, $x(0) = x_0$, $|u| \leq 1$. Soient H_0, H_1 les relèvements hamiltoniens de F_0, F_1 , soit $z(\cdot) = (x(\cdot), p(\cdot))$ une extrémale singulière sur $[0, t_f]$, le long de cette extrémale, on a $H_1(z(t)) = 0$. En dérivant deux fois par rapport au temps, on obtient les équations

$$\begin{aligned} H_1(z(t)) &= \{H_1, H_0\}(z(t)) = 0 \\ \{\{H_1, H_0\}, H_0\}(z(t)) + u_s(t)\{\{H_1, H_0\}, H_1\}(z(t)) &= 0 \end{aligned} \quad (1.10)$$

et (1.10) définit le contrôle singulier u_s feedback dynamique, en dehors de $S := \{z \in T^*X \mid \{\{H_1, H_0\}, H_1\}(z) = 0\}$. Notons Σ la surface de commutation $H_1 = 0$ et $\Sigma_s : H_1 = \{H_1, H_0\} = 0$. En remplaçant u_s par sa valeur en fonction de z , on obtient le Hamiltonien vrai $H_s(z) := H(z, u(z))$. On a alors la proposition suivante.

Proposition 1.3. *En dehors de S , les extrémales singulières sont solutions de*

$$\dot{x} = \frac{\partial H_s}{\partial p}, \quad \dot{p} = -\frac{\partial H_s}{\partial x},$$

partant à $t = 0$ de $\Sigma_s \setminus S$ et sont contenues dans Σ_s . Autrement dit, Σ_s est invariant par le contrôle singulier.

Dans le cas du problème en temps minimal, le PMP nous assure que H_0 est non négatif. De plus la condition de Legendre généralisée nous donne $\{H_1, \{H_0, H_1\}\}(z(t)) \geq 0$, et les extrémales singulières sont classées par rapport à celle-ci. Si l'on suppose que $\{\{H_1, H_0\}, H_1\} \neq 0$ le long de l'extrémale (extrémale singulière dite *d'ordre 2*), alors on a la définition suivante.

Définition 1.6. Sous les hypothèses définies précédemment, une trajectoire singulière est *exceptionnelle* (i.e. $H = 0$) si $H_0 = 0$. Si $H_0 \neq 0$, elle est dite *elliptique* si $\{\{H_1, H_0\}, H_1\} < 0$, *hyperbolique* si $\{\{H_1, H_0\}, H_1\} > 0$.

Ainsi pour les **extrémale singulières**, les trajectoires hyperboliques (*resp.* elliptiques) sont donc candidats pour minimiser (*resp.* maximiser) le temps. Toutefois, les **extrémale régulières** sont tout aussi importantes. Dans le cas générique, elles sont classées par leur degré de contact avec la surface de commutations $\Sigma := \{H_1 = 0\}$. On fixe une extrémale référence $z(t) = (x(t), p(t))$ sur $[0, T]$ et on introduit la fonction de commutation $\Phi(t) := H_1(z(t))$, indexée Φ_+ ou Φ_- si le contrôle vaut $+1$ ou -1 . On écrit γ_+ , γ_- les arcs réguliers tels que $u = \pm 1$. On dit qu'un extrémale est *bang-bang* si elle est une succession d'arcs γ_+ et γ_- . En dérivant deux fois par rapport au temps t on a les conditions

$$\begin{aligned} \dot{\Phi}_+ &= \dot{\Phi}_- = \{H_0, H_1\}, \\ \ddot{\Phi}_\pm &= \{H_0, \{H_0, H_1\}\} \pm \{\{H_1, H_0\}, H_1\}, \end{aligned}$$

et on considère deux cas.

cas régulier Soit un point z_0 de Σ que l'on suppose être une hypersurface localement lisse. Le point z_0 est appelé un *point de commutation régulier* si $\{H_0, H_1\}(z_0) \neq 0$ (contact d'ordre un). L'extrémale est alors transverse à Σ en z_0 et localement, l'extrémale est de la forme $\gamma_- \gamma_+$ si $\dot{\Phi}(z_0) > 0$ et $\gamma_+ \gamma_-$ si $\dot{\Phi}(z_0) < 0$.

cas du pli Soit z_0 appartenant à $\Sigma_s := \{H_1 = \{H_0, H_1\} = 0\}$ que l'on suppose être localement une variété lisse de codimension deux. En un tel point, les extrémales rencontrent la surface de commutations avec un contact d'ordre au moins deux puisque $\dot{\Phi}_\pm = \ddot{\Phi}_\pm = 0$. Supposons que le contact est d'ordre deux pour chaque arc, c'est à dire $\ddot{\Phi}_\pm \neq 0$. Un tel point s'appelle *un pli* et il existe trois sous-cas.

Cas parabolique. Ici $\ddot{\Phi}_+$ et $\ddot{\Phi}_-$ ont le même signe en z_0 . Alors chaque extrémale est localement bang-bang avec au plus deux commutations et aucune extrémale singulière ne peut passer par z_0 .

Cas hyperbolique. Ici on a $\ddot{\Phi}_+ > 0$ et $\ddot{\Phi}_- < 0$ en z_0 . On a alors nécessairement que $\{\{H_1, H_0\}, H_1\}(z_0) > 0$ et par z_0 passe une extrémale singulière d'ordre deux (exceptionnelle ou elliptique) avec un contrôle singulier $|u_s| < 1$. Les extrémales sont alors localement bang-singulière-bang $\gamma_\pm \gamma_s \gamma_\pm$.

Cas elliptique. Ici on a $\ddot{\Phi}_+ < 0$ et $\ddot{\Phi}_- > 0$ en z_0 . Une connection avec une extrémale singulière est impossible. Les extrémales sont localement bang-bang mais le nombre de commutations n'est pas uniformément borné. Cependant il existe passant par z_0 , une extrémale singulière d'ordre deux (exceptionnelle ou elliptique) admissible.

1.2 Conditions nécessaires/suffisantes du deuxième ordre [AS04, BS12]

1.2.1 Conditions dans le cas d'un Hamiltonien régulier lisse

Cette section s'inspire de plus de Réf. [CCG11] où l'on peut retrouver les démonstrations des théorèmes et propositions suivantes. Considérons le problème de contrôle optimal autonome sous forme de Bolza suivant.

$$\dot{x}(t) = f(x(t), u(t)) \quad (1.11)$$

et

$$C(u) = g(t_f, x(t_f)) + \int_0^{t_f} f^0(x(s), u(s)) ds. \quad (1.12)$$

Le temps final t_f est tout d'abord fixé. Les conditions aux deux bouts sont simples $x(0) = x_0$ et $x(t_f) = x_f$. Supposons que f^0, f soient lisses en x, u et que l'ensemble \mathbf{U} soit une variété sans bord ($u(t) \in \mathbb{R}^m$ en coordonnées). Ceci est donc une restriction forte puisque dans la formulation du Principe du Maximum de Pontryagin, les contrôles sont à valeurs dans un domaine quelconque, qui pour une grande partie des problèmes est contraint. Plaçons nous dans le cadre analytique, c'est à dire que f, f^0, g sont analytiques et considérons enfin seulement les extrémales normales (*i.e.* $p^0 \neq 0$). Le problème revient alors à chercher un contrôle essentiellement borné, mesurable tel qu'en coordonnées, $u \in L^\infty([0, t_f]) = L^\infty([0, t_f], \mathbb{R}^m)$. Soit \bar{u} un contrôle optimal dont on

veut obtenir des conditions nécessaires d'optimalités du deuxième ordre, et soit \bar{x} la trajectoire optimale associée, Lipschitz, et définie sur tout l'intervalle $[0, t_f]$.

Pour tout $s \in [0, t_f]$, l'application entrée-sortie pour le système augmenté (1.6)

$$F_s : u \mapsto \tilde{x}(s, u) \in \mathbb{R}^n$$

qui associe un contrôle u à la solution du système augmenté en s , partant de $\tilde{x}(0) = (x_0, 0)$ est bien définie et lisse sur un voisinage dans $L^\infty([0, s])$ de \bar{u} , en raison du théorème des fonctions implicites, et

$$F'_s(\bar{u}) \delta u := \delta x(s), \quad \delta u \in L^\infty([0, s]),$$

où δx est la solution de

$$\delta \dot{x}(t) = \frac{\partial f}{\partial x}(\bar{x}(t), \bar{u}(t)) \delta x(t) + \frac{\partial f}{\partial u}(\bar{x}(t), \bar{u}(t)) \delta u(t), \quad \delta x(0) = 0.$$

Les conditions nécessaires du premier ordre pour un contrôle non contraint sont obtenues du fait que F_{t_f} ne peut être localement ouverte en \bar{u} . Rappelons le résultat standard suivant, d'application ouverte non linéaire.

Théorème 1.3. *Soit $F : E \rightarrow \mathbb{R}^n$ une application lisse définie sur un espace de Banach E . Soit u un point régulier ($F'(u)$ est surjective), alors F est localement ouverte en u .*

Par conséquent, \bar{u} est un point critique de F_{t_f} et il existe un covecteur non nul $\bar{\lambda} \in (\mathbb{R}^n)^*$ tel que $\bar{\lambda} F'_{t_f}(\bar{u}) = 0$. Ceci est la règle de Lagrange qui nous donne le principe du maximum de Pontryagin dans sa forme faible. En effet, soit \bar{p} l'application Lipschitz à valeur dans $(\mathbb{R}^n)^*$, solution des équations adjointes

$$\dot{p}(t) = -p(t) \frac{\partial f}{\partial x}(\bar{x}(t), \bar{u}(t)), \quad p(t_f) = \bar{\lambda}.$$

Pour tout $\delta u \in L^\infty([0, t_f])$,

$$0 = \bar{\lambda} F'_{t_f}(\bar{u}) \delta u = \bar{p}(t_f) \delta x(t_f).$$

En intégrant par parties,

$$\int_0^{t_f} \frac{\partial H}{\partial u}(\bar{x}(t), \bar{p}(t), \bar{u}(t)) \delta u(t) dt = 0$$

Ainsi, $\partial_u H(\bar{x}(t), \bar{p}(t), \bar{u}(t)) = 0$ presque partout sur $[0, t_f]$. D'autres conditions d'optimalité locale sont obtenues à partir du résultat suivant d'application ouverte du deuxième ordre.

Théorème 1.4. *Soit $F : E \rightarrow \mathbb{R}^n$ une application lisse définie sur un espace de Banach E . Soit u un point critique de corang un ($\text{codim Im } F'(u) = 1$). Soit $\lambda \neq 0 \in (\mathbb{R}^n)^*$ dans $[\text{Im } F'(u)]^\perp$. Si $\lambda F''(u)$ est indéfinie sur $\text{Ker } F'(u)$, alors F est ouverte sur un voisinage de u .*

La forme bilinéaire $\lambda F''(u) \in \mathcal{L}(E, \mathcal{L}(E, \mathbb{R})) \simeq \mathcal{L}_2(E, E; \mathbb{R})$ est appelée la *dérivée seconde intrinsèque* de F en u et est définie à un scalaire près dans le cas de corang un. Par la suite, on considère une trajectoire optimale $\bar{x}(\cdot)$ dont le contrôle associé \bar{u} soit de corang un. En particulier, la trajectoire admet un unique (à un scalaire près) relèvement $(\bar{x}(\cdot), \bar{p}(\cdot), p^0, \bar{u}(\cdot))$ sur $[0, t_f]$, que l'on suppose être normal ($p^0 \neq 0$). Dans notre situation, on applique le théorème précédent à l'application entrée-sortie associée au système augmenté, définie précédemment. On doit donc avoir que $\bar{\lambda} F''_{t_f}(\bar{u})$ soit semi-définie sur $\text{Ker } F'_{t_f}(\bar{u})$ pour que l'optimalité locale soit possible. Pour $s \in [0, t_f]$, on définit la forme bilinéaire symétrique $Q_s := \bar{\lambda} F''_s(\bar{u})$ et $K_s := \text{Ker } F'_s(\bar{u})$. L'expression de Q_s dépend du fait que t_f soit fixé ou non.

La condition suivante, qui n'est qu'une réécriture de la condition de Legendre stricte (1.7), assurera la définie négativité de Q_s sur tout $L^2([0, s])$ pour s suffisamment petit :

$$\frac{\partial^2 H}{\partial u^2}(\bar{x}(t), \bar{p}(t), \bar{u}(t)) \leq -\alpha I_m, \quad t \in [0, t_f], \quad (1.13)$$

pour $\alpha > 0$. Une extrémale vérifiant (1.13) est donc régulière. On peut définir au voisinage d'une extrémale régulière le Hamiltonien vrai lisse (cf. corollaire 1.2), $H(x, p) = H(x, p, u(x, p)) = \max_u H(x, p, u)$, vérifiant $\dot{z}(t) = \vec{H}(\bar{z}(t))$, avec $z = (x, p)$, $t \in [0, t_f]$ et $\vec{H} := (\nabla_p H, -\nabla_x H)$ le gradient symplectique. Le Hamiltonien vrai est aussi noté H , puisque le nombre d'argument évite toute confusion avec le pseudo-Hamiltonien.

Proposition 1.4. *Si l'extrémale $(\bar{x}(\cdot), \bar{p}(\cdot), \bar{u}(\cdot))$ vérifie la condition de Legendre stricte, alors Q_s est définie négative pour s petit.*

Clairement, si $s \leq t$, alors $B_{t|K_t} < 0$ implique $B_{s|K_s} < 0$, d'où la définition suivante.

Définition 1.7. On définit le *premier instant conjugué* t_c , le long d'une extrémale $(x(\cdot), p(\cdot), p^0, u(\cdot))$ régulière, comme le supremum des temps t tels que Q_t soit définie négative, *i.e.*

$$t_c = \sup\{t > 0 \mid B_{t|K_t} < 0\}.$$

Le point $x(t_c)$ est appelé *premier point conjugué*.

Le Hamiltonien vrai lisse permet de donner une définition équivalente au premier instant conjugué. Introduisons pour cela la notion suivante.

Définition 1.8. Une solution de l'équation linéarisée le long de z , *i.e.* de l'équation de Jacobi

$$\delta\dot{z}(t) = d\vec{H}(z(t))\delta z(t), \quad (1.14)$$

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 $\delta x(t) = 0$.

Cette notion permet de caractériser et calculer les temps conjugués d'une extrémale régulière.

Proposition 1.5. *Un instant $s \in]0, t_f]$ est un temps conjugué le long d'une extrémale régulière si et seulement si il existe un champ de Jacobi $\delta z = (\delta x, \delta p)$ vertical en 0 et s , tel que $\delta x \neq 0$ sur $[0, s]$.*

Proposition 1.6. *Soit une extrémale régulière dont on note $t_c \in]0, t_f]$ le premier instant conjugué. Alors $B_{t_c|K_{t_c}} \in \mathcal{L}(K_{t_c})$ a un noyau non trivial.*

La question que l'on se pose maintenant est : est-ce que la trajectoire $\bar{x}(\cdot)$ est nécessairement non optimale après le premier instant conjugué t_c ? Pour ce faire, la forme quadratique Q_t doit être indéfinie pour $t > t_c$. Cependant, il peut arriver dans des cas dégénérés, que Q_t reste semi-définie sur un intervalle $[t_c, t_c + \eta]$, $\eta > 0$. Dans le cadre analytique, cela ne peut pas arriver et nécessairement pour $t > t_c$, Q_t est indéfinie. On obtient ainsi la condition nécessaire suivante, d'optimalité locale à l'ordre deux, pour des extrémales régulières, dans le cadre analytique de corang un.

Théorème 1.5. *Pour une extrémale régulière dont le contrôle analytique associé est de corang un, l'absence de temps conjugué sur $]0, t_f]$ est une condition nécessaire d'optimalité locale pour la topologie L^∞ .*

Il est à noter que ce théorème n'est qu'une condition nécessaire. Et contrairement à la dimension finie, il n'y a pas ici d'argument de compacité qui puisse nous faire passer à une condition suffisante d'optimalité. Cependant, il y a tout de même un résultat qui assure l'optimalité locale des extrémales normales, basé sur une théorie, qui s'appuie sur des constructions géométriques des *champs d'extrémals*. Il est important que l'extrémale soit régulière car cela assure l'existence du Hamiltonien vrai lisse au voisinage de l'extrémale, nécessaire pour le résultat suivant.

Théorème 1.6. *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 C^0 .*

En résumé, sous les hypothèses appropriées, avant le premier point conjugué, l'optimalité locale est vérifiée pour un grand voisinage dans C^0 de la trajectoire, tandis qu'après l'instant conjugué, l'optimalité locale est perdue, même pour de petits voisinages dans L^∞ .

Algorithmes de calcul de points conjugués dans le cas régulier de corang un

Cette sous-section reprend une partie des travaux de Réfs. [BCT07a, BCT07b] où les auteurs présentent à la fois la théorie des points conjugués mais aussi le calcul algorithmique de ceux-ci et applique ce calcul à plusieurs applications en mécanique spatiale entre autres. On sait maintenant comment caractériser a posteriori l'optimalité locale d'une extrémale issue du Principe du Maximum de Pontryagin. Il faut maintenant pouvoir être capable de calculer le premier instant conjugué pour une extrémale donnée. On introduit pour cela la fonction exponentielle.

Définition 1.9. Pour $z_0 \in T^*X$, on note $z(t, z_0)$ la solution de $\dot{z}(t) = \vec{H}(z(t))$, $z(0) = z_0$. En coordonnées locales, $z = (x, p)$ et la *fonction exponentielle* est définie au voisinage de p_0 , pour t, x_0 fixés, par

$$\exp_{x_0} t\vec{H}(p_0) = x(t, x_0, p_0).$$

Cette définition revient à la définition de l'application exponentielle dans le cadre riemannien.

Dans le cadre analytique de corang un, où l'on ne considère que les extrémales normales et où le problème de contrôle est à temps final fixé, avec des conditions initiales et finales simples (*i.e.* $x(0) = x_0$, $x(t_f) = x_f$), on peut calculer le premier instant conjugué à l'aide de l'application exponentielle, à l'aide du résultat suivant.

Proposition 1.7. *Si $(\bar{x}(\cdot), \bar{p}(\cdot), p^0, \bar{u}(\cdot))$ est une extrémale normale, régulière, dont le contrôle analytique associé est de corang un, alors $\bar{x}(t_c)$ est un point conjugué si et seulement si $\bar{p}(0)$ est un point critique de $\exp_{x_0} t_c \vec{H}(\cdot)$.*

Remarque 1.1. La notion de point conjugué peut être généralisée dans le cas où les conditions terminales $x(t_f) = x_f$ sont remplacées par $x(t_f) \in X_f$, où X_f est une sous-variété différentiable de X . On note alors $X_f^\perp = \{(x, p) \mid x \in X_f, p \in T_x X_f\}$. Le temps T est dit *focal*, et $z(T)$ est appelé un *point focal*, s'il existe un champ de Jacobi $\delta z(t) = (\delta x(t), \delta p(t))$ tel que $\delta x(0) = 0$ et $\delta z(T)$ soit tangent à X_f^\perp . On étend la notion de point focal classique en géométrie riemannienne Réf. [dC92].

Remarque 1.2. Il est à noter que le vecteur adjoint augmenté $\tilde{p} = (p^0, p(\cdot))$ est défini à un scalaire près. En effet, si l'on considère le pseudo-Hamiltonien $H(x, \tilde{p}, u) = \tilde{p} \cdot \tilde{f}(x, u)$, $\tilde{f} = (f^0, f)$, alors $u(x, \lambda \tilde{p}) = u(x, \tilde{p})$, pour tout $\lambda \in \mathbb{R}$. On a alors que $x(t, x_0, \lambda \tilde{p}_0) = x(t, x_0, \tilde{p}_0)$ et $\tilde{p}(t, x_0, \lambda \tilde{p}_0) = \lambda \tilde{p}(t, x_0, \tilde{p}_0)$, avec p^0 constant.

Ceci permet de calculer le premier temps conjugué dans le cas d'un problème à temps fixé et normal. Or le domaine de la fonction exponentielle dépend tout d'abord du temps final, fixé ou non, et d'autre part, de l'extrémale, normale ou anormale. On ne donne ici que les algorithmes dans le cas normal.

Cas normal. Dans le cas normal, on a $p^0 < 0$ et puisque le vecteur adjoint $(p^0, p(\cdot))$ est défini à un scalaire près, on peut le normaliser tel que $p^0 = -1$.

Temps final fixé. Si le temps final est fixé, alors le domaine de $\exp_{x_0} t\vec{H}(\cdot)$ est un sous-ensemble de $T_{x_0}^*X$ localement difféomorphe à \mathbb{R}^n . On doit calculer 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 . Ensuite on calcule

$$\text{rang} \left(\delta x_1(t), \dots, \delta x_n(t) \right),$$

qui vaut n en dehors d'un temps conjugué et est plus petit ou égal à $n - 1$ en un temps conjugué.

Temps final libre. Dans ce cas, le principe du maximum de Pontryagin apporte la condition supplémentaire $H = \partial_t g(t_f, x(t_f))$ le long de l'extrémale (car le problème est autonome). En particulier, cela est vrai en l'instant 0. On doit en tenir compte dans le calcul des champs de Jacobi et vérifier l'optimalité locale dans un voisinage des extrémales vérifiant cette condition. On introduit pour cela l'ensemble

$$P = \{p_0 \in T_{x_0}^*X \mid H(x_0, p_0) = \frac{\partial g}{\partial t}(t_f, x(t_f))\}.$$

C'est alors une sous-variété de $T_{x_0}^*X$ de codimension un si $\partial_p H(x_0, p_0) = f(x_0, u(x_0, p_0)) \neq 0$. Et le domaine de définition de $\exp_{x_0} t\vec{H}(\cdot)$ est un sous-ensemble de P localement difféomorphe à \mathbb{R}^{n-1} . On fournit trois tests équivalents pour tester l'optimalité locale d'une extrémale donnée, $(x(\cdot), p(\cdot), -1, u(\cdot))$, $x(0) = x_0$, $p(0) = p_0$. Le troisième test étant celui utilisé dans la pratique.

– **Test 1.** On considère les $n - 1$ champs de Jacobi δz_i , verticaux en 0 et satisfaisant la condition $\delta p_i(0) \in T_{p_0}P$, autrement dit, satisfaisant la condition

$$f(x_0, u(x_0, p_0)) \cdot \delta p_i(0) = 0. \quad (1.15)$$

On calcule ensuite les champs de Jacobi le long de l'extrémale associée et l'instant conjugué vient lorsque

$$\text{rang} \left(\delta x_1(t), \dots, \delta x_{n-1}(t) \right) \leq n - 2.$$

- **Test 2.** Une autre possibilité et de considérer une fois encore les n champs de Jacobi $\delta z_i = (\delta x_i, \delta p_i)$, ayant pour conditions initiales $\delta x_i(0) = 0$, $\delta p_i = e_i$, où $(e_i)_{i=1, \dots, n}$ est la base canonique de \mathbb{R}^n . Ensuite on calcule

$$\text{rang}\left(\delta x_1(t), \dots, \delta x_n(t)\right),$$

qui vaut $n - 1$ en dehors d'un temps conjugué et est plus petit ou égal à $n - 2$ en un temps conjugué.

- **Test 3.** Enfin le dernier test prend en considération le temps t comme une variable de la fonction exponentielle. Un instant conjugué t_c est tel que le point (t_c, p_0) soit un point critique de la fonction exponentielle, où p_0 est restreint à P . La dérivée de l'exponentielle en t par rapport au temps est la dynamique f en t du système. Pour calculer le premier temps conjugué, on détermine les $n - 1$ champs de Jacobi verticaux en 0 et vérifiant (1.15) puis on teste

$$\text{rang}\left(\delta x_1(t), \dots, \delta x_{n-1}(t), f(x(t), u(x(t), p(t)))\right)$$

qui vaut n en dehors d'un temps conjugué et est plus petit ou égal à $n - 1$ en un temps conjugué.

Remarque 1.3. les algorithmes présentés nécessitent simultanément l'intégration des équations variationnelles (de Jacobi) et du flot hamiltonien. Les tests de rang présentés peuvent soit être calculés à l'aide de la décomposition en valeurs singulières ou encore lorsque le système est carré, par le calcul du déterminant.

1.2.2 Conditions pour un problème temps minimal affine mono-entrée

Le calcul de points conjugués dans le cadre affine temps minimal est détaillé Réfs. [BCT07a, BCT07b]. On considère un système affine mono-entrée de la forme

$$\dot{x}(t) = F_0(x(t)) + u(t)F_1(x(t)), \quad (1.16)$$

avec comme condition initiale $x(0) = x_0 \in \mathbb{R}^n$. Le problème étudié est le transfert à temps minimal (*i.e.* $\min t_f$). Les champs de vecteurs F_0, F_1 sont lisses et le contrôle u est à valeur dans \mathbb{R} . Les trajectoires optimales sont singulières, cependant on ne peut pas utiliser les algorithmes précédents puisque la condition de Legendre stricte (1.13) n'est pas vérifiée.

D'après Réf. [BK93], supposons que F_1 soit transverse à la trajectoire, on peut alors identifier F_1 avec ∂_{x_n} dans un voisinage tubulaire de x et le système se décompose en

$$\begin{aligned} \dot{\tilde{x}} &= F(\tilde{x}, x_n) \\ \dot{x}_n &= g(\tilde{x}, x_n) + u, \quad \text{où } \tilde{x} = (x_1, \dots, x_{n-1}). \end{aligned}$$

Définition 1.10. La *transformation intégrale* (ou de Goh) consiste à choisir $v = x_n$ comme nouveau contrôle, et donc considérer le système réduit $\tilde{x} = F(\tilde{x}, x_n)$ avec le Hamiltonien associé $\tilde{H} = \langle \tilde{p}, F(\tilde{x}, v) \rangle$, $v \in \mathbb{R}$.

Les liens entre les deux systèmes et avec ce qui a été vu dans le cas régulier sont les suivants.

Lemme 1.1. *Le triplet (x, p, u) est une extrémale du système (1.16) si et seulement si $(\tilde{x}, \tilde{p}, v)$ est une extrémale du système réduit. De plus est vérifié le long de $(x(\cdot), p(\cdot))$,*

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \frac{\partial H}{\partial u} &= - \frac{\partial \tilde{H}}{\partial v}, \\ \frac{\partial}{\partial u} \frac{d^2 H}{dt^2} \frac{\partial H}{\partial u} &= - \frac{\partial^2 \tilde{H}}{\partial v^2}, \end{aligned}$$

La condition suivante, dite de Legendre stricte généralisée est donc la condition de Legendre stricte pour le système réduit et remplace donc la condition (1.13) du cadre régulier.

$$\frac{\partial}{\partial u} \frac{\partial^2 H}{\partial t^2} \frac{\partial H}{\partial u}(x(t), p^0, p(t), u(t)) \geq -\alpha I_m, \quad t \in [0, t_f], \quad (1.17)$$

Pour un système affine mono-entrée, la condition de Goh (1.8) est automatiquement vérifiée et donc seul la condition (1.17) doit être testée. La notion de champ de Jacobi est elle aussi légèrement différente dans le cas totalement singulier. La définition 1.8 du cadre régulier est remplacée par la notion suivante.

Définition 1.11. Soit $z(\cdot)$ une extrémale singulière, cf. 1.1, solution de \vec{H}_s sur $[0, t_f]$ et contenue dans Σ_s . L'équation variationnelle sous contrainte suivante

$$\begin{aligned} \delta \dot{z} &= d\vec{H}_s(z(t))\delta z \\ dH_1 &= d\{H_0, H_1\} = 0 \end{aligned} \quad (1.18)$$

est appelée équation de Jacobi. Un champ de Jacobi $\delta z(t) = (\delta x, \delta p)$ est une solution non triviale de l'équation de Jacobi. Il est dit *semi-vertical au temps t* si $\delta x(t) \in \mathbb{R}F_1(x(t))$.

La condition de semi-verticalité provient de la condition de verticalité pour le système réduit. Enfin la notion de temps conjugué se retrouve elle aussi changée. La proposition 1.5 est remplacée par la suivante.

Proposition 1.8. *Un instant $s \in]0, t_f]$ est un temps conjugué le long d'une extrémale singulière si et seulement si il existe un champ de Jacobi non trivial $\delta z = (\delta x, \delta p)$ semi-vertical en 0 et s .*

Avant d'obtenir des conditions suffisantes d'optimalité locales, il est nécessaire de faire certaines hypothèses sur l'extrémale référence. On définit les hypothèses suivantes que l'on supposera vérifiées par la suite.

- (A1) $t \mapsto x(t)$ est une immersion injective. On utilise cette hypothèse pour identifier le contrôle le long de la trajectoire à zéro, par feedback. Ensuite, à partir de cette normalisation, on impose les hypothèses suivantes.
- (A2) *Condition de régularité forte.*
Pour tout $t \in [0, t_f]$, $\text{Vect}\{\text{ad}^k F_0.F_1(x(t)) \mid k = 0, \dots, n-2\}$ est de codimension un, où $\text{ad} F_0.F_1$ signifie $[F_0, F_1]$.
- (A3) Le champ de vecteurs $\text{ad}^2 F_1.F_0$ n'appartient pas à $\text{Vect}\{\text{ad}^k F_0.F_1(x(t)) \mid k = 0, \dots, n-2\}$ le long de la trajectoire référence.
- (A4) Si $n = 2$, F_0 et F_1 sont indépendants le long de la trajectoire référence. Si $n \geq 3$, F_0 n'appartient pas à $\text{Vect}\{\text{ad}^k F_0.F_1(x(t)) \mid k = 0, \dots, n-3\}$ le long de la trajectoire référence.

Ainsi le théorème 1.6 portant sur les conditions suffisantes d'optimalité locale dans le cas régulier est remplacé par le suivant.

Théorème 1.7. *Sous les hypothèses définies précédemment, soit x une trajectoire singulière de référence sur $[0, t_f]$. Dans le cas hyperbolique et exceptionnel (resp. elliptique), la trajectoire est localement temps minimisant (resp. maximisant) par rapport à toutes les trajectoires possédant les mêmes extrémités et contenues dans un voisinage C^0 de x , jusqu'au premier temps conjugué.*

On présente deux algorithmes pour les cas hyperbolique et elliptique. Le premier est basé sur la transformation de Goh, le second est équivalent et intrinsèque au problème. Ce deuxième étant celui utilisé dans la pratique. Voir Réf. [BCT07a] pour plus d'algorithmes, dans le cas exceptionnel par exemple.

Cas hyperbolique ou elliptique. Dans ce cas, $\langle p, \text{ad}^2 F_1.F_0 \rangle \neq 0$ et $H_0 \neq 0$.

- **Test 1.** Après avoir utilisé la transformation de Goh, nous nous retrouvons dans le cas régulier présenté en §1.2.1, avec $\tilde{x} = \partial_{\tilde{p}} \tilde{H}$ et $\tilde{p} = -\partial_{\tilde{x}} \tilde{H}$. Soient $\delta\tilde{z}_1, \dots, \delta\tilde{z}_{n-2}$ les $n-2$ champs de Jacobi, $\delta\tilde{z}_i = (\delta\tilde{x}_i, \delta\tilde{p}_i)$, verticaux en $t = 0$ et avec $\delta\tilde{p}(0)$ normalisé comme précédemment. Alors, t_c est un temps conjugué si

$$\text{rang}\left(\delta\tilde{x}_1(t_c), \dots, \delta\tilde{x}_{n-2}(t_c)\right) < n-2.$$

- **Test 2.** Le test suivant est intrinsèque et n'utilise donc pas la transformation de Goh. On considère maintenant les champs de Jacobi de la définition 1.11, c'est à dire avec la contrainte linéarisée en $z(0)$. Le vecteur adjoint $p(0)$ est normalisé à 1 et donc on prend en compte la condition $p(0).\delta p(0) = 0$. Enfin, la condition de verticalité en $t = 0$ est remplacée par $\delta x(0) \in \mathbb{R}F_1(x(0))$. L'ensemble des champs de Jacobi vérifiant la contrainte linéarisée, la contrainte de normalisation de $p(0)$ et la contrainte de semi-verticalité en $t = 0$, forme un

sous-espace linéaire de dimension $n-2$. Si l'on note $\delta z_1, \dots, \delta z_{n-2}$, $n-2$ champs de Jacobi formant une base de cet ensemble, alors t_c est un temps conjugué si

$$\text{rang} \left(\delta x_1(t_c), \dots, \delta x_{n-2}(t_c), F_1(x(t_c)) \right) < n - 1.$$

Sous les hypothèses définies précédemment, ce test est équivalent à

$$\det \left(\delta x_1(t_c), \dots, \delta x_{n-2}(t_c), F_1(x(t_c)), F_0(x(t_c)) \right) = 0.$$

CHAPITRE 2

Méthodes algorithmiques pour le contrôle optimal

2.1 Suivi de chemin différentiel

Les méthodes de continuation et homotopique permettent de résoudre des problèmes dépendant d'un ou plusieurs paramètres. Une utilisation fréquente consiste à introduire un paramètre artificiel déformant le problème de départ en un nouveau plus simple, puis de résoudre une série de problèmes, pas à pas, jusqu'à revenir au problème de départ. Le paramètre homotopique et la nature de la déformation sont choisis dans la pratique de manière heuristique, en relation avec les contraintes du problème et les paramètres physiques le régissant. Ce choix est guidé d'une part par le problème plus simple à résoudre mais aussi par le chemin lui-même, menant au problème de départ, que l'on souhaite suffisamment régulier et convergent. Une autre possibilité est de vouloir connaître l'évolution des solutions en fonction de paramètres physiques déjà présents dans la description du problème. Dans chacun des cas, on notera le paramètre homotopique λ , que l'on peut considérer dans $[0, 1]$. On parlera de continuation dès lors que λ est monotone (croissant dans notre cas). L'approche homotopique est plus générale puisque λ peut varier arbitrairement. Dans ce manuscrit, nous nous intéressons aux approches de continuation ou homotopique, dans le cadre du contrôle optimal. Les méthodes sont utilisées ici pour résoudre des problèmes de tir (ou aux deux bouts) résultant du Principe du Maximum de Pontryagin. Le problème simple est résolu par des méthodes de tir et la méthode homotopique permet ensuite de suivre un chemin de zéros d'une certaine fonction. Nous introduisons tout d'abord le suivi de chemin différentiel appliqué au contrôle optimal dans un cadre restreint, pour faire le lien avec les conditions du second ordre présentées §1.2.1. Puis d'un point de vue algorithmique, pour la présentation de HAMPATH dans la section suivante, nous mentionnerons le cadre général pour lequel le code s'applique.

Nous reprenons ici une partie présentée Réf. [Tré12]. Supposons en premier lieu que l'on ait une famille de problèmes de contrôle optimal paramétrisée par $\lambda \in [0, 1]$ de la forme suivante. Pour chaque λ , on minimise

$$C_{t_f, \lambda}(u) = \int_0^{t_f} f^0(x(t), u(t), \lambda) dt$$

avec un temps final fixé $t_f > 0$, sujet aux contraintes différentielles sur la variété X fixée,

$$\dot{x}(t) = f(x(t), u(t), \lambda), \quad u(t) \in U, \quad t \in [0, t_f],$$

et dont les conditions aux limites simples sont

$$x(0) = x_0, \quad x(t_f) = x_f.$$

On suppose que le domaine $U = \mathbb{R}^m$, et que f, f^0 sont lisses par rapport à (x, u, λ) . On peut réécrire ce problème de contrôle optimal sous la forme d'un problème d'optimisation en dimension infinie sous contrainte :

$$\min_{F_{x_0, t_f, \lambda}(u_\lambda) = x_f} C_{t_f, \lambda}(u_\lambda),$$

où $F_{x_0, t_f, \lambda}$ est l'application entrée-sortie qui à u_λ associe $x(t_f, u_\lambda)$ avec $x(0) = x_0$. D'après la règle des multiplicateurs de Lagrange, si le contrôle u_λ est optimal alors il existe $(\psi_\lambda, \psi_\lambda^0) \in (\mathbb{R}^n)^* \times \mathbb{R} \setminus \{0\}$ tel que $\psi_\lambda dF_{x_0, t_f, \lambda}(u_\lambda) + \psi_\lambda^0 dC_{t_f, \lambda}(u_\lambda) = 0$. Supposons qu'il n'y ait pas d'extrémale anormale minimisante. Sous cette hypothèse, on peut fixer $\psi_\lambda^0 = -1$ puisque $(\psi_\lambda, \psi_\lambda^0)$ est défini à un scalaire près. On cherche alors un couple $(u_\lambda, \psi_\lambda)$ tel que $G(\lambda, u_\lambda, \psi_\lambda) = 0$, où la fonction G est définie par

$$G(\lambda, u, \psi) = \begin{pmatrix} \psi dF_{x_0, t_f, \lambda}(u) - dC_{t_f, \lambda}(u) \\ F_{x_0, t_f, \lambda}(u) - x_f \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial L_{t_f, \lambda}}{\partial u}(u, \psi) \\ F_{x_0, t_f, \lambda}(u) - x_f \end{pmatrix},$$

où $L_{t_f, \lambda}(u, \psi) = \psi F_{x_0, t_f, \lambda}(u) - C_{t_f, \lambda}(u)$ est le lagrangien. Soit $(\bar{\lambda}, u_{\bar{\lambda}}, \psi_{\bar{\lambda}})$ un zéro de G . D'après nos hypothèses, G est suffisamment régulière et si la dérivée partielle de G par rapport à (u, ψ) en $(\bar{\lambda}, u_{\bar{\lambda}}, \psi_{\bar{\lambda}})$ est inversible, alors d'après le théorème des fonctions implicites, on peut résoudre localement l'équation $G(\lambda, u_\lambda, \psi_\lambda) = 0$, et la solution $(u_\lambda, \psi_\lambda)$ dépend de λ de manière au moins \mathcal{C}^1 . Analysons maintenant les conditions d'inversibilité de la jacobienne de G par rapport à (u, ψ) . La matrice jacobienne est

$$\begin{pmatrix} Q_{t_f, \lambda} & dF_{x_0, t_f, \lambda}(u)^* \\ dF_{x_0, t_f, \lambda}(u) & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.1)$$

où $Q_{t_f, \lambda}$ est la forme quadratique associée au système augmenté, définie section 1.2.1 par

$$Q_{t_f, \lambda} = \frac{\partial^2 L_{t_f, \lambda}}{\partial^2 u}(u, \psi, \psi^0) \Big|_{\ker \frac{\partial L_{t_f, \lambda}}{\partial u}}.$$

La matrice (2.1) d'opérateurs est inversible si et seulement si l'application linéaire $dF_{x_0, t_f, \lambda}(u)$ est surjective et la forme quadratique $Q_{t_f, \lambda}$ est non dégénérée. La surjectivité de $dF_{x_0, t_f, \lambda}(u)$ signifie que le contrôle u n'est pas un point singulier pour l'application entrée-sortie non augmentée. Or, pour ce problème de contrôle optimal –

pas de contrainte sur u et sous forme de Lagrange – les contrôles singuliers pour F sont associés aux extrémales anormales. Ainsi, l’absence de trajectoire anormale minimisante suffit à assurer la surjectivité de $dF_{x_0, t_f, \lambda}(u)$. La non dégénérescence de $Q_{t_f, \lambda}$ est liée au concept de point conjugué (voir section 1.2.1). On peut donc conclure que tant que l’on a pas de contrôle singulier minimisant ni de point conjugué le long de la procédure de continuation, alors la méthode de continuation fonctionne localement et la solution $(u_\lambda, \psi_\lambda)$ qui est calculée localement est de classe \mathcal{C}^1 par rapport au paramètre λ . Ces deux conditions assurent l’existence d’une solution locale pour la méthode de continuation.

Cependant, nous sommes intéressés par les méthodes homotopiques qui ne restreignent pas le paramètre λ à être monotone croissant le long du chemin. De plus, les méthodes homotopiques utilisées en pratique se basent sur le point de vue géométrique en considérant le formalisme hamiltonien et l’application exponentielle. Ceci permet entre autres de se placer en dimension finie. Faisons l’hypothèse suivante :

- (H1) Pour tout $\lambda \in [0, 1]$, il existe une extrémale régulière normale $(x_\lambda, p_\lambda, u_\lambda)$ dans un voisinage de laquelle le Hamiltonien maximisé est lisse.

Voir Réf. [BSS11] pour une analyse détaillée dans le cadre riemannien. Soit $\lambda_0 \in [0, 1]$, sous notre hypothèse, l’application

$$(p_0, \lambda) \mapsto x(t_f, x_0, p_0, \lambda)$$

associant (p_0, λ) à la valeur en t_f de la projection sur l’espace d’état de la solution $z = (x, p)$ de

$$\dot{z}(t) = \vec{H}(z(t), \lambda), \quad t \in [0, t_f], \quad z(0) = (x_0, p_0),$$

est une fonction implicite lisse dans un voisinage de $(p_0(\lambda_0), \lambda_0)$. Ici, $H(x, p, \lambda) = H(x, p, u(x, p, \lambda), \lambda) = \max_{u \in U} H(x, p, u, \lambda)$ où $u(x, p, \lambda)$ est défini implicitement grâce à la condition de Legendre. Dans ces coordonnées, on définit la *fonction homotopique* (voir Réf. [GZ79])

$$h(p_0, \lambda) = x(t_f, x_0, p_0, \lambda) - x_f$$

qui est lisse sur le voisinage précédent. Supposons que la solution $p_0(\lambda_0)$ de l’équation de tir n -dimensionnelle $h(\cdot, \lambda_0) = 0$ fournit une extrémale le long de laquelle aucun champs de Jacobi ne devient vertical sur $]0, t_f]$. En particulier, il n’y a pas de temps conjugué sur $]0, t_f]$ et nous avons une solution optimale \mathcal{C}^0 -localement du problème de contrôle optimal en λ_0 . Typiquement, résoudre la famille de problème de contrôle optimal consiste tout d’abord à calculer un zéro de $h(\cdot, \lambda_0) = 0$ pour $\lambda_0 = 0$, puis on cherche à suivre l’évolution des solutions pour atteindre si possible un zéro de h pour une valeur cible du paramètre, $\lambda = 1$ par exemple. On introduit pour cela le cadre suivant. Supposons que l’intérieur du domaine $\Omega \subset \mathbb{R}^n \times [0, 1]$, soit constitué seulement

de points réguliers de h et que la restriction de h sur $\lambda = 0$ soit une submersion, *i.e.* :

$$\begin{aligned} \text{rang } h'(p_0, \lambda) &= n, \quad (p_0, \lambda) \in \mathring{\Omega}, \\ \text{rang } \frac{\partial h}{\partial p_0}(p_0, \lambda)|_{\lambda=0} &= n, \quad p_0 \in \mathbb{R}^n, \end{aligned}$$

alors comme conséquence, l'ensemble de niveau $\{h = 0\}$ est une sous-variété de dimension un de \mathbb{R}^{n+1} appelée le *chemin de zéros*, partant de $\lambda = 0$ jusqu'à $0 < \lambda_f \leq 1$. Pour n'importe quel $r = (p_0, \lambda) \in \Omega$, $\dim \ker h'(r) = 1$ ainsi on peut définir le vecteur tangent $T(r)$ comme étant l'unique – à l'orientation près – vecteur unitaire du noyau de h' . L'orientation est choisie telle que le déterminant suivant, qui ne s'annule pas,

$$\det \begin{bmatrix} h'(r) \\ {}^t T(r) \end{bmatrix}$$

ait un signe constant sur chaque composante connexe de Ω . Ceci fournit une paramétrisation par l'abscisse curviligne des composantes connexes de $\{h = 0\}$ qui sont calculées en intégrant l'équation différentielle Réf. [AG03] (avec $' = d/ds$) :

$$r'(s) = T(r(s)), \quad r(0) = r_0 \in \{h = 0\},$$

avec $r_0 = (p_0(0), 0)$ obtenu grâce à une méthode de tir. Le but est alors de classifier chaque composante à un difféomorphisme près, sachant qu'il n'existe que deux possibilités Réf. [AG03] : elle est soit difféomorphique à \mathbb{R} soit à \mathbf{S}^1 . Un problème difficile est de fournir des conditions suffisantes à la *Smale* Réf. [AG03] qui assure l'existence d'une branche joignant $\lambda = 0$ à $\lambda = 1$. De plus, une autre difficulté vient du fait que pour une valeur λ_0 du paramètre, on doit comparer le coût associé à chaque composante de $\{h = 0\} \cap \{\lambda = \lambda_0\}$. Cet aspect global est responsable d'une possible perte de régularité – même de discontinuité – de la fonction valeur (associant λ à la valeur minimale du coût quand elle existe) et du chemin de zéros globalement optimal. Résoudre le problème de contrôle optimal dépendant d'un paramètre revient donc à calculer et comparer l'ensemble des composantes de $\{h = 0\}$.

Pour une branche connexe donnée, il existe différentes possibilités pouvant empêcher le chemin d'atteindre la cible voulue $\lambda = 1$. Notons tout d'abord que pour tout point $r = (p_0, \lambda)$ d'une même composante, r est un point régulier. Le rang de $h'(r)$ est donc égal à n où la jacobienne de h en r est donnée par

$$h'(r) = \begin{bmatrix} \frac{\partial h}{\partial p_0}(r) & \frac{\partial h}{\partial \lambda}(r) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial p_0}(t_f, x_0, p_0, \lambda) & \frac{\partial x}{\partial \lambda}(t_f, x_0, p_0, \lambda) \end{bmatrix}.$$

Supposons que pour tout s , $\lambda'(s) \neq 0$, ce qui est équivalent à

$$\text{rang } \frac{\partial x}{\partial p_0}(t_f, x_0, p_0(s), \lambda(s)) = n.$$

Le paramètre λ est donc monotone croissant (puisque $\lambda'(0) > 0$) et la seule possibilité ne permettant pas d'atteindre $\lambda = 1$ est que le vecteur adjoint p_0 , le long du chemin de zéros, s'approche du bord de Ω s'il est borné ou parte en l'infini en norme, d'après le critère de maximalité Réf. [Dem06]. Le chemin peut alors converger vers une extrémale anormale pour la valeur limite de λ . La définition suivante permet de traiter l'autre cas lorsqu'il existe \bar{s} tel que $\lambda'(\bar{s}) = 0$.

Définition 2.1. Un point $c(\bar{s}) = (p_0(\bar{s}), \lambda(\bar{s}))$ dans $\{h = 0\}$ est un *turning point* si $\lambda'(\bar{s}) = 0$. Ceci est équivalent à dire que

$$\text{rang } \frac{\partial x}{\partial p_0}(t_f, x_0, p_0(\bar{s}), \lambda(\bar{s})) = n - 1.$$

Autrement dit, un turning point est un point tel que t_f soit un instant conjugué pour $\lambda = \lambda(\bar{s})$ et $p_0(\bar{s})$, $x(t_f, x_0, p_0(\bar{s}), \lambda(\bar{s}))$ sont respectivement les points critique, conjugué correspondant. En un turning point d'ordre un, tel que $\lambda''(\bar{s}) \neq 0$, il résulte un changement de variation du paramètre λ , d'où le nom. La définition suivante nous permet par la suite de donner le résultat le plus intéressant ici en ce qui concerne les turning point.

Définition 2.2. On définit $\bar{c} = c(\bar{s}) \in \{h = 0\}$ comme étant le *premier turning point* (le long du chemin partant de $c(0)$) si, $\lambda'(\bar{s}) = 0$, et pour tout $s \in [0, \bar{s}[$, la courbe $t \mapsto x(t, x_0, p_0(s), \lambda(s))$ ne possède pas d'instant conjugué sur $]0, t_f]$.

Remarque 2.1. Sous une hypothèse de Legendre forte uniforme en lambda, il est suffisant de supposer l'absence de point conjugué sur $]0, t_f]$ pour $s = 0$.

Théorème 2.1 (Réf. [CD12]). *Soit $c(\bar{s}) \in \{h = 0\}$ le premier turning point d'ordre un; alors pour $s > \bar{s}$, $|s - \bar{s}|$ suffisamment petit, il existe un temps conjugué sur $]0, t_f[$.*

Après le premier turning point d'ordre un, l'optimalité locale est perdue et il n'est donc pas utile de poursuivre le calcul de la branche.

Remarque 2.2. Dans la preuve du théorème 2.1, Réf. [CD12], est définie l'homotopie étendue

$$\tilde{h}(p_0, \lambda, t_c) = (h(t_f, x_0, p_0, \lambda), \det \frac{\partial x}{\partial p_0}(t_c, x_0, p_0, \lambda)).$$

Il est montré que l'homotopie étendue est bien définie et régulière dans un voisinage de $(p_0(\bar{s}), \lambda(\bar{s}), t_f)$. On peut donc utiliser les techniques homotopiques et paramétrer les composantes connexes de $\{\tilde{h} = 0\}$ par l'abscisse curviligne, pour calculer le chemin de zéros de l'homotopie étendue, qui fournit la connaissance supplémentaire du premier instant conjugué le long du chemin.

Il existe une dernière difficulté pour le suivi de chemin différentiel. Quand une composante connexe du chemin de zéros considérée est difféomorphe à \mathbb{R} , les extrémités (si elles existent) sont des points critiques de h . La classification des points de $\partial\Omega$ débute par le résultat suivant qui n'est qu'une simple conséquence du lemme de Morse.

Proposition 2.1 ([AG03]). *Soit $\bar{c} \in \{h = 0\}$ un point critique de corang un hyperbolique non dégénéré de h . Alors, il existe des coordonnées d_1, \dots, d_{n+1} tel que, dans un voisinage de \bar{c} , $\{h = 0\}$ est équivalent à*

$$d_1^2 - d_2^2 = 0, \quad d_3 = \dots = d_{n+1} = 0.$$

Dans ce cas, la dérivée seconde intrinsèque s'écrit, à un scalaire près,

$$\bar{\mu}h''(\bar{c})|_{(\ker h'(\bar{c}))^2} \in \text{Sym}(2, \mathbb{R}) \subset \mathbf{M}(2, \mathbb{R}) \simeq \mathcal{L}(\ker h'(\bar{c}), \ker h'(\bar{c}); \mathbb{R})$$

où $\bar{\mu} \in (\mathbb{R}^n)^*$ est n'importe quel covecteur non nul dont le noyau est $\text{Im } h'(\bar{c})$. L'hyperbolicité signifie que la matrice symétrique d'ordre deux est non dégénérée et possède deux valeurs propres de signe opposé. Par conséquent, le chemin de zéros est localement constitué de deux courbes lisses s'intersectant transversalement, résultant en une bifurcation en \bar{c} .

2.2 Le package HAMPATH

Le programme (ou compilateur) HAMPATH implémente les idées détaillées sections 1.1, 1.2 et 2.1 puisqu'il regroupe méthodes homotopiques différentielles et calcul des conditions du second ordre. Il fait tout d'abord suite aux thèses de T. Haberkorn Réf. [Hab04] et P. Martinon Réf. [Mar05], dirigées par J. Gergaud, qui introduisent les méthodes homotopiques discrète, simpliciale et différentielle pour la résolution de problèmes de mécanique spatiale, comme par exemple, le problème de transfert orbital de satellite autour de la Terre. Le code HAMPATH fait de plus suite aux travaux de B. Bonnard, J-B. Caillaud et E. Trélat puisqu'il élargit les possibilités du package *Cotcot* Réfs. [BCT05, BCT07a], conçu pour l'étude de flots hamiltoniens lisses et le calcul des conditions d'optimalités du second ordre associées. HAMPATH est basé sur le formalisme hamiltonien ce qui en fait un outil privilégié pour l'étude et la résolution de problème de contrôle optimal à partir des conditions nécessaires du premier ordre données par l'application du Principe du Maximum de Pontryagin. En effet, dans un premier temps, à partir du Hamiltonien maximisé et des conditions de transversalité, HAMPATH génère par différentiation automatique, les équations d'états et adjointes ainsi que les équations variationnelles requises dans le calcul des dérivées. Il compile ensuite les codes *Fortran* décrivant le problème, fournissant alors une collection de fonctions *Matlab* qui permettent dans le cas lisse (i) de résoudre un problème donné grâce aux méthodes de tir, (ii) de résoudre une famille de problèmes dépendant continûment d'un paramètre, par des méthodes homotopiques différentielles et (iii) de calculer les solutions des équations de Jacobi le long d'extrémales afin de tester les conditions d'optimalité du second ordre. À cela, il a été rajouté pour traiter le cas non lisse, (i) une méthode de tir multiple qui aura permis par la suite la résolution de problèmes où le

contrôle est composé d’arcs bang (saturant la contrainte) et singulier (non saturant) (voir chapitre 3) et (ii) une méthode de tir simple avec détections des commutations et calcul des champs de Jacobi discontinus, pour la résolution de problèmes exclusivement bang-bang. Dans un premier temps le code a été validé sur des problèmes de transfert orbitaux en 3 dimensions et à 2 corps, à consommation minimale, repris des travaux cités ci-avant, dirigés par J. Gergaud. Cet apport a donné lieu à une première publication Réf. [CCG11]. Par la suite, HAMPATH a été intensivement utilisé par B. Daoud pendant sa thèse intitulée “Contribution au contrôle optimal du problème circulaire restreint des 3 corps” Réf. [Dao11], et utilisé pour de nombreuses applications en mécanique quantique, Réfs. [BCC11, BC12, BCG⁺12, BCS11, BCSS10].

2.2.1 Le Hamiltonien maximisé

Le compilateur HAMPATH peut être utilisé à partir simplement du Hamiltonien maximisé lisse (voir corollaire 1.2) suivant

$$H(t, x, p, \lambda) : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}.$$

La dynamique n’est pas supposée autonome dans le cadre général, c’est pourquoi la variable t apparaît dans la définition de H . La description du Hamiltonien est écrite en *Fortran* dans le fichier `hfun.f90` sous forme d’une sous-routine appelée `hfun`. HAMPATH compile le fichier puis fournit une collection de fonctions *Matlab* par l’intermédiaire de fichiers MEX compilés. Voir le manuel téléchargeable à l’adresse présente Réf. [CCG10] pour l’installation du compilateur, la description des fonctions *Matlab* et *Fortran* et découvrir son utilisation détaillée sur un exemple simple. Les premières fonctions disponibles sont :

hfun : Une simple interface *Matlab* du code *Fortran* éponyme.

hvfun : Permet de calculer la valeur du champ de vecteurs hamiltonien \vec{H} le long d’une extrémale. Le calcul du gradient symplectique \vec{H} est automatisé. On utilise la Différenciation Automatique (DA) pour calculer \vec{H} à partir de H . Le logiciel *Tapenade* Réf. [HP12] est appelé par le compilateur HAMPATH afin de fournir un code *Fortran* correspondant au champ de vecteur \vec{H} , à partir du fichier `hfun.f90`. Une interface *Matlab* du résultat est ensuite fournie pour l’utilisation pratique.

exphvfun : Permet d’intégrer le flot hamiltonien (IVP) suivant

$$\dot{z}(t) = \vec{H}(t, z(t), \lambda), \quad t \in [t_0, t_f], \quad z(0) = (x_0, p_0),$$

où la variable λ est fixée et donnée en paramètre à la fonction `exphvfun` avec t_0 , t_f et $z(0)$. L’intégration utilise un schéma explicite à un pas d’ordre élevé et à pas variable.

Le code utilisé est *dopri5* Réfs. [HrW93, HW96], un intégrateur numérique de type Runge-Kutta (4)5.

expdhvfun : Puisque \vec{H}' est évalué le long de la solution courante (voir définition 1.8), on doit intégrer simultanément sur $[t_0, t_f]$ les systèmes en z et δz pour calculer les champs de Jacobi

$$\dot{z}(t) = \vec{H}(t, z(t), \lambda), \quad \delta \dot{z}(t) = \frac{\partial \vec{H}}{\partial z}(t, z(t), \lambda), \quad z(0) = z_0, \quad \delta z(0) = \delta z_0,$$

où la variable λ est fixée et donnée en paramètre à la fonction **expdhvfun** avec t_0, t_f, z_0 et δz_0 . La matrice hamiltonienne \vec{H}' est calculée par DA à partir de \vec{H} . Il y a donc deux niveaux de DA. Dans le cas d'un schéma explicite à un pas, DA sur le code d'intégration et VAR (intégration des équations variationnelles) sont identiques si le contrôle du pas est fait seulement sur la composante z (et non sur $(z, \delta z)$) et ainsi le schéma suivant commute

$$\begin{array}{ccc} (IVP) & \xrightarrow{\text{Intégration numérique}} & z(t, z_0, \lambda) \\ \text{Dérivation} \downarrow & & \downarrow \text{Dérivation} \\ (VAR) & \xrightarrow{\text{Intégration numérique}} & \frac{\partial z}{\partial z_0}(t, z_0, \lambda) \end{array}$$

Pour obtenir cela, le code *dopri5* doit être légèrement modifié. En effet, considérons l'équation différentielle

$$\dot{y} = f(t, y), \quad y(x_0) = y_0.$$

D'après Réf. [HrW93], pour calculer la solution $y(t)$ sur $[t_0, \bar{t}]$, un schéma explicite à un pas subdivise $[t_0, \bar{t}]$ en sous-intervalles d'extrémités $t_0 < t_1 < \dots < t_m = \bar{t}$ et on calcule l'approximation $y_k \approx y(t_k)$ par une formule du type

$$y_{k+1} = y_k + h_k \Phi(h_k, t_k, y_k),$$

où le pas $h_k = t_{k+1} - t_k$. On dit que la méthode est à l'ordre p si pour tout problème $\dot{y} = f(t, y)$, $y(t_0) = y_0$ (avec f suffisamment régulier), l'erreur locale après un pas satisfait $y_1 - y(t_0 + h) = \mathcal{O}(h^{p+1})$. Pour un intégrateur à pas variable, le pas courant est calculé afin que l'erreur locale soit toujours environ égale à une tolérance fixée par l'utilisateur. On utilise une deuxième approximation $\tilde{y}_k \approx y(t_k)$, telle que l'ordre \tilde{p} de la deuxième méthode soit inférieur strictement à celui de la première et telle que les mêmes évaluations de f soient utilisées, pour estimer l'erreur locale. L'estimation de l'erreur locale, au premier pas, est alors définie par

$$\|y_1 - \tilde{y}_1\| = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \left(\frac{y_{k1} - \tilde{y}_{k1}}{sc_k} \right)^2}, \quad (2.2)$$

où N est la dimension de y , où y_{k1}, \tilde{y}_{k1} sont les composantes des vecteurs y_1, \tilde{y}_1 respectivement et $sc_k = atol_k + rtol_k \max(|y_{k0}|, |y_{k1}|)$, où $atol_k, rtol_k$ sont les tolérances absolue et relative associées à chaque composante du vecteur y . Ici $y = (z, \delta z)$ et $N = 2n + 2n \times k$ où k est le nombre de champ de Jacobi et n la dimension de l'état. On fixe donc N à $2n$ afin de faire le contrôle du pas sur z .

Pour le calcul de champ de Jacobi dans le cas régulier (cf. section 1.2.1), la condition initiale δz_0 est $\delta z^i(0) = (0, e_i)$, $i = 1, n$ afin de calculer $\partial_{p_0} x(t, x_0, p_0, \lambda)$ ($\{e_1, \dots, e_n\}$ étant la base canonique). L'hypothèse qu'aucun champ de Jacobi ne devienne vertical le long de la solution sur $]0, t_f]$ est équivalent à tester que le rang de $\{\delta x^i(t), \dots, \delta x^n(t)\}$ est égal à n pour $t \in]0, t_f]$. En pratique, un changement de signe du déterminant des champs de Jacobi peut être surveillé, avec l'inconvénient que le déterminant, au signe près, soit égal au produit des valeurs singulières, toutes s'annulant pour $t = 0$. Un test complémentaire est alors d'inspecter l'amplitude de la plus petite des valeurs singulières le long de l'extrémale référence.

De manière plus générale, il est possible avec HAMPATH de donner plusieurs Hamiltoniens maximisés lisses, si l'on connaît les instants où l'on passe d'un Hamiltonien à un autre. Supposons que l'intervalle $[t_0, t_f]$ soit décomposé en N sous-intervalles $[t_i, t_{i+1}]$ tels que l'on ait sur chaque sous-intervalle, un Hamiltonien maximisé lisse. L'extrémale vérifie alors

$$\dot{z}(t) = \vec{H}_i(t, z, \lambda), \quad t \in [t_{i-1}, t_i], \quad i = 1, \dots, N,$$

avec $t_N = t_f$. Il faut alors aussi fournir les instants t_i à `hfun`, `exphvfun` et `expdhvfun`.

2.2.2 Présentation des méthodes de tir

En contrôle optimal, il existe deux grandes familles de méthodes locales, les méthodes dites directes et les méthodes indirectes. Ce ne sont pas les seules, puisqu'il existe aussi des méthodes de modèles prédictifs pour résoudre des systèmes en temps réel à partir d'observations de l'état, ou encore des méthodes globales basées sur les équations de Hamilton-Jacobi-Bellman par exemple. Les méthodes directes consistent à transformer le problème de contrôle en un problème d'optimisation de grande taille en dimension finie. Voir Réfs. [Bet98, Bet10] pour une présentation générale, Réf. [Hag00] pour des détails sur la discrétisation via des schémas de Runge-Kutta et Réf. [BP84] pour des méthodes plus récentes de "tir multiple direct". Pour cela, l'état et/ou le contrôle sont discrétisés, sur une grille de temps choisie en amont, et les valeurs de l'état et/ou le contrôle en les instants de la grille deviennent les inconnues du problème d'optimisation. Ceci implique qu'il n'est pas nécessaire de connaître *a priori* la structure du contrôle contrairement aux méthodes indirectes, telles que les méthodes de tir que l'on présente par la suite. Pour plus de détails sur ces méthodes, voir Réfs. [AMR95, Ces83, SB93] par exemple. Nous devons de plus faire la distinction entre plusieurs cas, car suivant le type de structure rencontrée, la méthode de tir choisie est différente. Supposons tout

d'abord que le contrôle maximisant soit lisse par rapport au temps, nous utiliserons alors les méthodes de tir simple pour résoudre le problème de contrôle. Nous détaillons ensuite les méthodes de tir multiple. Celles-ci peuvent être utilisées pour plusieurs raisons. Initialement, les méthodes de tir multiples permettent de renforcer la stabilité et la convergence des méthodes de tir simple, en discrétisant l'intervalle de temps. On discrétise pour intégrer sur des intervalles de temps plus courts et ainsi réduire les erreurs numériques. La subdivision est donc connue alors que les points initiaux à chaque instant de la grille sont des inconnues de la méthode de tir multiple. Maintenant, si le domaine du contrôle est fermé, il est possible que le contrôle sature la contrainte ou non. Dans ce cas, pour résoudre des problèmes de type bang-bang ou bang-singulier par exemple, il est nécessaire d'appliquer une méthode de tir multiple. Nous verrons enfin que dans le cas particulier de problèmes bang-bang, nous pouvons aussi utiliser des méthodes de tir simple avec détections des commutations. Dans ce cas, seul le point initial est une inconnue (comme pour le tir simple), et il est alors possible de calculer les sauts aux instants de commutations sur les équations variationnelles. Ces méthodes de tir simple avec détections des commutations deviennent nécessaires lorsqu'il y a un nombre important de commutations rendant l'écriture du problème de tir multiple complexe.

Méthode de tir simple

Supposons que l'on ait une famille de problèmes de contrôle optimal paramétrisée par $\lambda \in [0, 1]$ de la forme suivante. Pour chaque λ , on minimise

$$C_{t_f, \lambda}(u) = g(t_f, x(t_f), \lambda) + \int_0^{t_f} f^0(t, x(t), u(t), \lambda) dt$$

avec un temps final $t_f > 0$ fixé ou libre, sujet aux contraintes différentielles sur la variété X fixée,

$$\dot{x}(t) = f(t, x(t), u(t), \lambda), \quad u(t) \in \mathbf{U}_\lambda, \quad t \in [0, t_f],$$

et dont les conditions aux limites sont

$$x(0) \in X_{0, \lambda}, \quad x(t_f) \in X_{f, \lambda},$$

où $X_{0, \lambda}$ et $X_{f, \lambda}$ sont des sous-variétés de \mathbb{R}^n . On suppose que la variété \mathbf{U}_λ est sans bord, et que f, f^0 sont lisses par rapport à (t, x, u, λ) . Le système n'est donc pas nécessairement autonome. Chaque donnée peut dépendre du paramètre λ . Intéressons-nous tout d'abord à la résolution du problème à λ fixé. Le PMP (voir section 1.1) nous assure ici qu'une trajectoire optimale est la projection d'une extrémale $z(\cdot) = (x(\cdot), p(\cdot))$ solution des équations $\dot{z}(t) = \vec{H}(t, z(t), \lambda)$, où H est le Hamiltonien maximisé. Les conditions aux extrémités $x(0) \in X_{0, \lambda}$ et $x(t_f) \in X_{f, \lambda}$, associées aux conditions de transversalité (1.5) données par le PMP

$$p(0) \perp T_{x(0)}X_{0, \lambda}, \quad p(t_f) - p^0 \frac{\partial g}{\partial x}(t_f, x(t_f), \lambda) \perp T_{x(t_f)}X_{f, \lambda},$$

peuvent se restreindre en coordonnées à $2n$ équations algébriques, regroupées dans une fonction du type $E(z_0, z_f, \lambda) = 0 \in \mathbb{R}^{2n}$. Si le temps de transfert t_f est libre, alors la condition (1.4) doit être prise en compte et l'on a $E(z_0, t_f, z_f, \lambda) = 0 \in \mathbb{R}^{2n+1}$. On peut réécrire la condition nécessaire de solution du problème de contrôle optimal à t_f fixé sous la forme suivante d'un problème aux deux bouts

$$(TPBVP) \begin{cases} \dot{z}(t) = \vec{H}(t, z(t), \lambda) \\ E(z(0), z(t_f), \lambda) = 0 \end{cases} \quad (2.3)$$

Soit $z(\cdot, z_0, \lambda)$ la solution du problème de Cauchy

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

Définissons alors, dans le cas où t_f est fixé, la *fonction de tir simple* S_λ par

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

Résoudre (2.3) est alors équivalent à résoudre l'équation de tir

$$S_\lambda(z_0) = 0.$$

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

Remarque 2.3. Si le temps final t_f est libre, alors la fonction S_λ est remplacée par

$$\begin{aligned} S_\lambda : \mathbb{R}^{2n+1} &\longrightarrow \mathbb{R}^{2n+1} \\ (z_0, t_f) &\longmapsto S_\lambda(z_0, t_f) := E(z_0, t_f, z(t_f, z_0, \lambda), \lambda) \end{aligned}$$

La description de la fonction E doit être écrite en *Fortran* dans le fichier `efun.f90` sous forme d'une sous-routine appelée `efun`. HAMPATH compile les fichiers `hfun.f90` et `efun.f90` pour fournir en plus de `hfun`, `hvfun`, `exphvfun` et `expdhvfun` les fonctions *Matlab* suivantes :

ssolve : La fonction codant la méthode de tir simple. La fonction de tir simple est assemblée automatiquement à partir de `hfun` et `efun`. Pour la résolution du système non linéaire $S_\lambda(z_0) = 0$, on utilise le code *Fortran* `hybrj` (de la librairie *Minpack* Réf. [MGH80]). Le code `hybrj` implémente l'algorithme hybride de Powell Réf. [Pow70], basé sur la méthode classique de Newton-Raphson. La particularité de la méthode hybride de Powell vient du fait qu'elle s'inspire de l'algorithme de Lenverberg-Marquardt en ce sens où elle combine les méthodes de Newton-Raphson et de plus forte pente. La recherche nécessite une première approximation du zéro de S_λ recherché, qui est passé

en paramètre à `ssolve`. On doit fournir au code `hybrj`, la fonction de tir S_λ ainsi que sa jacobienne S'_λ donnée par

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

si t_f est fixé et par

$$\begin{aligned} \frac{\partial S_\lambda}{\partial z_0}(z_0, t_f) &= \frac{\partial E}{\partial z_0}(z_0, t_f, z(t_f, z_0, \lambda), \lambda) + \frac{\partial E}{\partial z_f}(z_0, t_f, z(t_f, z_0, \lambda), \lambda) \frac{\partial z}{\partial z_0}(t_f, z_0, \lambda), \\ \frac{\partial S_\lambda}{\partial t_f}(z_0, t_f) &= \frac{\partial E}{\partial t_f}(z_0, t_f, z(t_f, z_0, \lambda), \lambda) + \frac{\partial E}{\partial z_f}(z_0, t_f, z(t_f, z_0, \lambda), \lambda) \frac{\partial z}{\partial t_f}(t_f, z_0, \lambda), \end{aligned}$$

si t_f est libre. Les dérivées partielles de E par rapport à z_0 , z_f et t_f sont calculées automatiquement par DA. Puisque $z(t_f, z_0, \lambda)$ est la solution en t_f du système défini par le Hamiltonien maximisé, on a

$$\frac{\partial z}{\partial t_f}(t_f, z_0, \lambda) = \vec{H}(t_f, z(t_f, z_0, \lambda), \lambda).$$

Pour la dérivée variationnelle $\partial_{z_0} z(t_f, z_0, \lambda)$, la première option est d'utiliser les différences finies. Cependant, il est crucial d'utiliser en pratique des intégrateurs à pas variable qui calculent la discrétisation adaptée grâce au contrôle de l'erreur locale. Les différences finies sont connues ici pour donner de mauvais résultats car les deux grilles, évaluées dynamiquement, intervenant par exemple dans le calcul de $z(t_f, z_0, \lambda)$ et $z(t_f, z_0 + \delta, \lambda)$, peuvent être différentes et engendrées une non-différentiabilité artificielle. L'important est donc de forcer la grille à rester la même dans les deux cas. Ceci est connu sous le nom de *Internal Numerical Derivative* (IND, Réf. [Boc81]). Une alternative à cela est d'utiliser DA sur le code d'intégration. En raison du pas variable, le code définit seulement une fonction différentiable par morceaux et DA calcule effectivement la dérivée par morceaux, fournissant le même ordre de précision que IND pour des intégrateurs à pas variable à un pas Réf. [HrW93]. La dernière option est d'assembler explicitement le système variationnel pour calculer les champs de Jacobi. C'est cette option qui est utilisée ici. Puisque \vec{H}' est évalué le long de la solution courante (comme pour `expdhvfun`), on doit intégrer simultanément sur $[t_0, t_f]$ les systèmes en z et δz ($2n + 4n^2$ dimensions pour obtenir la dérivée complète avec δz une matrice d'ordre $2n$)

$$\dot{z}(t) = \vec{H}(t, z(t), \lambda), \quad \delta \dot{z}(t) = \frac{\partial \vec{H}}{\partial z}(t, z(t), \lambda), \quad z(0) = z_0, \quad \delta z(0) = I_{2n}.$$

On rappelle que dans le cas d'un schéma explicite à un pas et pas variable, DA sur le code d'intégration et VAR (intégration du système variationnel augmenté) sont équivalents si le contrôle du pas est réalisé seulement sur la composante z (et non sur $(z, \delta z)$). \vec{H} et $\partial_z \vec{H}$ étant calculés par DA. Finalement, bien que les matrices et vecteurs présents

dans les calculs soient de taille relativement petite, tous les produits vecteur-vecteur, matrice-vecteur ou matrice-matrice, sont réalisés pas des routines performantes venant des bibliothèques *Blas* 1, 2 et 3, Réfs. [LHKK79, DDCHH88, DDCHD90].

sfun : Cette fonction *Matlab* fournit le calcul de la fonction de tir.

sjac : Cette fonction *Matlab* fournit le calcul de la jacobienne de la fonction de tir.

Méthode de tir multiple

La méthode de tir multiple peut être utilisée dans un premier temps afin de renforcer la stabilité de la résolution. Pour cela, on discrétise l'intervalle $[t_0, t_f]$ en N sous-intervalles $[t_i, t_{i+1}]$. Les valeurs $z(t_i)$, à l'entrée de chaque intervalle, sont alors les inconnues du système à résoudre. On ajoute ensuite aux conditions de transversalité, des conditions de raccordement aux instants t_i . Il devient par contre nécessaire de remplacer la méthode de tir simple lorsque l'on doit prendre en compte par exemple des contraintes sur l'état, qui se traduisent par un saut sur le vecteur adjoint, ou encore des contraintes sur le contrôle, rendant les solutions optimales de type bang-bang ou bang-singulier par exemple. Dans tous les cas, il est nécessaire de connaître la séquence exacte des arcs et donc de connaître le nombre d'instantants de commutations. Les instantants de commutations étant ici des inconnues de la méthode. Nous nous inspirons des méthodes de tir multiple présentées Réfs. [Mau76, SB93] pour écrire de manière générale, le type de problèmes aux limites multiples pouvant être résolus par HAMPATH grâce au tir multiple.

Supposons que la solution optimale vérifie

$$\dot{z}(t) = \vec{H}_{i_k}(t, z, \lambda), \quad k = 1, \dots, N, \quad i_k \in \llbracket 1, N \rrbracket, \quad t \in [t_{k-1}, t_k],$$

où $t_N := t_f$. Il existe au plus N champs de vecteurs hamiltoniens différents que l'on écrit dans **hfun**. Donnons tout d'abord les conditions aux deux bouts habituelles $x(0) \in X_{0,\lambda}$ et $x(t_f) \in X_{f,\lambda}$. Supposons ensuite qu'il existe des conditions de raccordement aux instantants t_k , pour $k = 1, \dots, N - 1$, de la forme

$$m_{i_k}(z(t_k, t_{k-1}, z_{k-1}, \lambda), z_k, \lambda) = 0, \quad k = 1, \dots, N - 1, \quad i_k \in \llbracket 1, N - 1 \rrbracket, \quad (2.4)$$

où $z(t_k, t_{k-1}, z_{k-1}, \lambda)$ est la solution de

$$\dot{z}(t) = \vec{H}_{i_k}(t, z(t), \lambda), \quad z(t_{k-1}) = z_{k-1}.$$

En l'absence de contraintes d'états par exemple, l'état et l'état adjoint sont absolument continus et les équations de raccordements sont

$$m_{i_k}(z(t_k, t_{k-1}, z_{k-1}, \lambda), z_k, \lambda) = z(t_k, t_{k-1}, z_{k-1}, \lambda) - z_k = 0.$$

Supposons maintenant que les instants de commutations soient déterminés par les équations suivantes.

$$\varphi_{i_k}(t_{i_k}, z_{i_k}, \lambda) = 0, \quad k = 1, \dots, N-1, \quad i_k \in \llbracket 1, N-1 \rrbracket \quad (2.5)$$

Dans le cas d'un problème bang-bang par exemple, ces équations se simplifient et peuvent s'écrire sous la forme

$$\varphi(t_k, z_k) = H_{i_{k+1}}(t_k, z_k, \lambda) - H_{i_k}(t_k, z_k, \lambda) = 0, \quad k = 1, \dots, N-1.$$

Afin de simplifier les notations, nous définissons maintenant

- $T := \{t_1, \dots, t_{N-1}\}$,
- $Z := \{z_0, \dots, z_{N-1}\}$,
- $\text{exp}Z := \{z(t_1, t_0, z_0, \lambda), \dots, z(t_f, t_{N-1}, z_{N-1}, \lambda)\} := \{ez_1, \dots, ez_N\}$.

Il est alors possible de rassembler les conditions de transversalité obtenues par le PMP avec les conditions 2.4 et 2.5 sous une même équation de la forme $E(T, Z, \text{exp}Z, \lambda) = 0 \in \mathbb{R}^{2nN+N-1}$ si t_f est fixé. La routine `efun` de `HAMPATH` correspond à la fonction E . On définit alors la *fonction de tir multiple* S_λ par

$$\begin{aligned} S_\lambda : \mathbb{R}^{2nN+N-1} &\longrightarrow \mathbb{R}^{2nN+N-1} \\ (T, Z) &\longmapsto S_\lambda(T, Z) := E(T, Z, \text{exp}Z, \lambda) \end{aligned}$$

Résoudre le problème de contrôle est équivalent à résoudre l'équation non linéaire suivante

$$S_\lambda(T, Z) = 0.$$

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

Remarque 2.4. Si le temps final t_f est libre, alors $T := \{t_1, \dots, t_{N-1}, t_f\}$ et on rajoute à E , la condition sur le Hamiltonien.

La fonction `ssolve` utilise les descriptions de la fonction E (codée dans `efun.f90`) et des différents Hamiltoniens (codés dans `hfun.f90`) pour former la fonction et fournir la méthode de tir multiple. La résolution du système non linéaire est réalisée par la routine `hybrj` et nécessite donc la jacobienne de S_λ qui est donnée par

$$S'_\lambda = \left[\left(\frac{\partial S_\lambda}{\partial t_k} \right)_{k=1, \dots, N-1} \quad \left(\frac{\partial S_\lambda}{\partial z_k} \right)_{k=0, \dots, N-1} \right],$$

où

$$\begin{aligned} \frac{\partial S_\lambda}{\partial t_k}(T, Z) &= \frac{\partial E}{\partial t_k}(T, Z, \text{exp}Z, \lambda) \\ &+ \frac{\partial E}{\partial ez_k}(T, Z, \text{exp}Z, \lambda) \frac{\partial z}{\partial t_f}(t_k, t_{k-1}, z_{k-1}, \lambda) \\ &+ \frac{\partial E}{\partial ez_{k+1}}(T, Z, \text{exp}Z, \lambda) \frac{\partial z}{\partial t_0}(t_{k+1}, t_k, z_k, \lambda), \quad k = 1, \dots, N-1, \end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned} \frac{\partial S_\lambda}{\partial z_k}(T, Z) &= \frac{\partial E}{\partial z_k}(T, Z, \exp Z, \lambda) \\ &+ \frac{\partial E}{\partial e z_{k+1}}(T, Z, \exp Z, \lambda) \frac{\partial z}{\partial z_0}(t_{k+1}, t_k, z_k, \lambda), \quad k = 0, \dots, N-1. \end{aligned}$$

Remarque 2.5. Si le temps final t_f est libre, alors t_f est une inconnue de la fonction de tir et la dérivée partielle par rapport à t_f est donnée par

$$\begin{aligned} \frac{\partial S_\lambda}{\partial t_f}(T, Z) &= \frac{\partial E}{\partial t_f}(T, Z, \exp Z, \lambda) \\ &+ \frac{\partial E}{\partial e z_N}(T, Z, \exp Z, \lambda) \frac{\partial z}{\partial t_f}(t_f, t_{N-1}, z_{N-1}, \lambda). \end{aligned}$$

Toutes les dérivées partielles de E sont calculées par DA. Puisque $z(t_k, t_{k-1}, z_{k-1}, \lambda)$, $k = 1, \dots, N$, est la solution en t_k du système défini par $\dot{z}(t) = \vec{H}_{i_k}(t, z(t), \lambda)$, $z(t_{k-1}) = z_{k-1}$, on a

$$\frac{\partial z}{\partial t_f}(t_k, t_{k-1}, z_{k-1}, \lambda) = \vec{H}_{i_k}(t_k, z(t_k, t_{k-1}, z_{k-1}, \lambda), \lambda).$$

Enfin, les dérivées partielles de z par rapport à t_0 et z_0 sont solutions d'équations variationnelles. La dérivée partielle par rapport au temps initial $\partial_{t_0} z(t_{k+1}, t_k, z_k, \lambda)$, pour $k = 1, \dots, N-1$, est solution en t_{k+1} de

$$\delta \dot{z}(t) = \frac{\partial \vec{H}_{i_k}}{\partial z}(t, z(t, t_k, z_k, \lambda), \lambda) \delta z, \quad \delta z(t_k) = -\vec{H}_{i_k}(t_k, z_k, \lambda) \in \mathbb{R}^{2n}.$$

La dérivée partielle par rapport à la condition initiale $\partial_{z_0} z(t_{k+1}, t_k, z_k, \lambda)$, pour $k = 0, \dots, N-1$, est solution en t_{k+1} de

$$\delta \dot{z}(t) = \frac{\partial \vec{H}_{i_k}}{\partial z}(t, z(t, t_k, z_k, \lambda), \lambda) \delta z, \quad \delta z(t_k) = I_{2n} \in \mathbb{R}^{2n}.$$

Méthode de tir simple avec détections des commutations

On s'intéresse ici au cas particulier de problèmes présentant des commutations, de type bang-bang par exemple. Supposons que l'on ait des contraintes sur le contrôle, *i.e.* $u \in \mathbf{U}$ avec bord. Supposons que la condition de maximisation du Hamiltonien nous donne

$$\begin{aligned} u &= u_1(t, z), & \text{si } \varphi(t, z) < 0, \\ u &= u_2(t, z), & \text{si } \varphi(t, z) > 0, \\ u &\in \overset{\circ}{\mathbf{U}}, & \text{si } \varphi(t, z) = 0, \end{aligned}$$

où φ est la *fonction de commutations* (ou *fonction de switch*) dont les zéros correspondent aux commutations du contrôle optimal. Supposons que les extrémales solutions

soient d'ordre un et qu'il n'existe qu'un nombre fini d'instantants de commutations t tels que $\varphi(t, z(t)) = 0$ le long de l'extrémale $z(\cdot)$. On note $H_1(t, z) := H(t, z, u_1(t, z))$ et $H_2(t, z) := H(t, z, u_2(t, z))$. Ainsi une extrémale $z(\cdot)$ est solution du problème à valeur initiale discontinu suivant

$$(IVP)_{\text{disc}} \begin{cases} \dot{z}(t) = \vec{H}_1(t, z(t)), & \text{si } \varphi(t, z) < 0 \\ \dot{z}(t) = \vec{H}_2(t, z(t)), & \text{si } \varphi(t, z) > 0 \\ z(t_0) = z_0 \end{cases}$$

et la fonction de tir ne dépend que du point initial z_0 si l'on détecte automatiquement durant l'intégration, les instantants de commutations. L'idée est donc durant l'intégration, (i) de détecter les commutations et (ii) de calculer l'instant et le point de commutation d'où repart l'intégration. Ces étapes sont primordiales, il ne faut pas laisser le contrôle du pas à l'intégrateur Réf. [MG07, HrW93] mais bien détecter pour améliorer à la fois le temps de calcul et la précision des calculs. La détection permet en effet de réduire considérablement le nombre de pas acceptés et rejetés. Une bonne détection est de plus importante afin de conserver l'ordre lors de l'intégration numérique, cf. Réf. [Man78].

Nous détaillons pour l'étape (i), deux possibilités. (i-a) Le code de l'intégrateur *dopri5* utilisé ici fait appel à une fonction auxiliaire, qui lui est passée en paramètre, à chaque pas accepté. Ainsi pour chaque pas accepté, il est possible de tester si le signe de la fonction de commutation a changé. Cependant, cela implique qu'à l'intérieur d'un même pas, pour chaque étage du schéma d'intégration, on doit s'assurer que le signe de la fonction de switch reste le même. Le signe doit être forcé sur un pas pour limiter le nombre de pas rejetés. (i-b) Une autre possibilité est de faire la détection sur n'importe quel pas, qu'il soit accepté ou non. Ici, il n'est pas nécessaire de fixer le signe de la fonction de switch à l'intérieur d'un pas. Cela implique toutefois des changements majeurs du code d'intégration. En effet, la fonction auxiliaire doit être appelée avant que le pas soit accepté. De plus, lorsqu'une commutation est détectée, le pas courant est remplacé par celui menant à la commutation, il faut donc recalculer l'approximation de l'erreur locale Eq. (2.2) et tester si le nouveau pas est accepté ou non. On peut noter que dans la majorité des cas, un pas accepté en (i-a) qui traverse une commutation, est accepté en (i-b) après réduction.

Une fois le pas accepté et une commutation détectée, il est nécessaire de la localiser. Pour cela, nous présentons encore deux possibilités. (ii-a) Nous pouvons tout d'abord utiliser la sortie dense fournie par l'intégrateur pour calculer le lieu de commutation par dichotomie sur le signe de la fonction de switch aux points approchés. Les méthodes (i-a) et (ii-a) sont celles utilisées Réf. [MG07]. (ii-b) Pour garder la précision du schéma utilisé, il est préférable d'utiliser une méthode de dichotomie (ou une méthode de Newton) toujours sur la fonction de commutation mais en prenant comme inconnue la longueur d'un pas. La fonction de switch est donc calculé en un vrai pas d'intégration, voir schéma Fig. 2.1. Supposons que l'on ait une commutation passant de \vec{H}_1 à \vec{H}_2 . On note alors

$z_1(t)$ la partie de l'extrémale solution de $\dot{z}(t) = \vec{H}_1(t, z(t))$ et $z_2(t)$, celle solution de $\dot{z}(t) = \vec{H}_2(t, z(t))$, après la commutation. Ainsi, en l'instant initial on a $z_1(t_0, t_0, z_0) := z_0$, en l'instant de commutation τ , on a $z_1(\tau, t_0, z_0) := z_1$ et $z_2(\tau, \tau, z_1) := z_1$, et en l'instant final, noté t_f , après la commutation, on a $z_2(t_f, \tau, z_1) := z_2$.

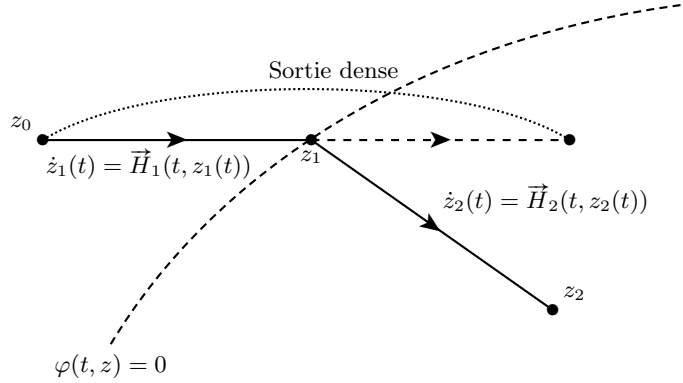


FIGURE 2.1 – Traversée d'une commutation.

Comme pour les méthodes de tir simple et multiple, nous avons besoin de la jacobienne de la fonction de tir. Celle-ci est décrite simplement comme pour la méthode de tir simple et fait donc intervenir la variation de l'extrémale en t_f par rapport à la condition initiale z_0 . Reprenons le calcul Réf. [MG07] dans le cas particulier d'une commutation passant de \vec{H}_1 à \vec{H}_2 avec les notations définies précédemment. On pose $g(t, z) := \varphi(t, z_1(t, t_0, z))$, alors si

$$\frac{\partial g}{\partial t}(\tau, z_0) = \frac{\partial \varphi}{\partial t}(\tau, z_1) + \frac{\partial \varphi}{\partial z}(\tau, z_1) \vec{H}_1(\tau, z_1) \neq 0,$$

alors il existe localement $z_0 \mapsto \tau(z_0)$ tel que $\varphi(\tau(z_0), z_1(t, t_0, z_0)) = 0$ et

$$\tau'(z_0) = -\frac{\frac{\partial g}{\partial z}(\tau(z_0), z_0)}{\frac{\partial g}{\partial t}(\tau(z_0), z_0)} = -\frac{\frac{\partial \varphi}{\partial z}(\tau, z_1) \text{d exp } \tau \vec{H}_1(z_0)}{\frac{\partial \varphi}{\partial t}(\tau, z_1) + \frac{\partial \varphi}{\partial z}(\tau, z_1) \vec{H}_1(\tau, z_1)}.$$

On note $\delta z_2(t) := \text{d exp } t \vec{H}_2(z_1(t, t_0, z_0)) \delta z_0$ avec $z_2(t_f, \tau(z_0), z_1(\tau(z_0), t_0, z_0))$ et $\delta z_1(t) := \text{d exp } t \vec{H}_1(z_0) \delta z_0$. La variation de z_2 en t_f par rapport à la condition initiale z_0 avant la commutation est alors donnée par

$$\delta z_2(t_f) = \frac{\partial z_2}{\partial t_0}(t_f, \tau, z_1) \tau'(z_0) \delta z_0 + \frac{\partial z_2}{\partial t_0}(t_f, \tau, z_1) \left(\frac{\partial z_1}{\partial t_f}(\tau, t_0, z_0) \tau'(z_0) \delta z_0 + \delta z_1(\tau) \right).$$

On se place maintenant en $t_f = \tau^+$ juste après la commutation. En passant à la limite, puisque

$$\frac{\partial z_2}{\partial t_0}(\tau^+, \tau, z_1) = -\vec{H}_2(\tau^+, z_1), \quad \frac{\partial z_2}{\partial z_0}(\tau^+, \tau, z_1) = I_{2n},$$

et

$$\frac{\partial z_1}{\partial t_f}(\tau, t_0, z_0) = \vec{H}_1(\tau, z_1)$$

alors

$$\delta z_2(\tau^+) = \delta z_1(\tau) + \left(\vec{H}_1(\tau, z_1) - \vec{H}_2(\tau^+, z_1) \right) \tau'(z_0) \delta z_0.$$

En remplaçant $\tau'(z_0)$ par sa valeur et puisque \vec{H}_2 est continue du temps t , on obtient finalement,

$$\delta z_2(\tau^+) = \left(I_{2n} + \frac{\left(\vec{H}_2(\tau, z_1) - \vec{H}_1(\tau, z_1) \right) \frac{\partial \varphi}{\partial z}(\tau, z_1)}{\frac{\partial \varphi}{\partial t}(\tau, z_1) + \frac{\partial \varphi}{\partial z}(\tau, z_1) \vec{H}_1(\tau, z_1)} \right) \delta z_1(\tau) = (I_{2n} + \alpha) \delta z_1(\tau). \quad (2.6)$$

Ainsi si les champs de vecteurs hamiltoniens associés à H_1 et H_2 sont égaux en τ , alors le terme de saut α est nul, et les équations variationnelles sont continues en ce point. En principe, en une commutation $\alpha \neq 0$ et l'on observe une discontinuité dans le calcul des champs de Jacobi. Dans la pratique, on intègre le système en z et δz et lorsqu'une commutation est détectée et localisée, on met à jour δz puis on continue l'intégration. Ce calcul est utilisé à la fois pour le calcul de la jacobienne de la fonction de tir et pour les champs de Jacobi, la condition initiale δz_0 étant arbitraire. Dans le cas particulier où $\varphi = H_2 - H_1$ alors $\partial_z \varphi = \partial_z H_2 - \partial_z H_1$ et $\partial_z \varphi \vec{H}_1 = \{H_1, H_2\}$.

Il est possible que l'extrémale en z_2 dépende aussi de l'instant initial si par exemple on utilise la détection de commutation à l'intérieur d'un arc dont l'instant initial est une inconnue d'un problème résolu par des méthodes de tir multiple. Dans ce cas la formule de la dérivée par rapport à l'instant initial reste identique à Eq. (2.6), simplement la condition initiale δz_0 est remplacée par $\delta t_0 = -H_1(t_0, z_0)$.

Un des intérêts de la méthode de tir simple avec détections des commutations et mise à jour des équations variationnelles, est qu'il est possible à la fois de résoudre des problèmes de type bang-bang via les conditions nécessaire du premier ordre, mais aussi de vérifier l'optimalité locale via les conditions du deuxième ordre, dans un cadre particulier, comme défini dans l'article Réf. [ST10a] par exemple. Considérons un système affine mono-entrée dont les solutions optimales sont bang-bang. L'auteur définit le premier instant conjugué d'une extrémale solution de manière analogue à la définition 1.7, seulement la forme quadratique impliquée dans la définition provient d'une application différente de l'application entrée-sortie dans le cadre lisse. De nombreuses références sur les conditions du deuxième ordre pour des problèmes bang-bang sont données Réf. [ST10a]. L'auteur utilise une procédure de régularisation qui consiste à introduire de nouveaux contrôles artificiels sous certaines contraintes, pour rendre le problème de contrôle optimal lisse pour $\lambda \in [0, 1[$ par exemple. L'apport principal de l'auteur dans cet article est alors de prouver la convergence, lorsque $\lambda \rightarrow 1$, du premier instant conjugué défini dans le cadre lisse, vers le premier instant conjugué pour le problème de départ, qui lui est bang-bang. Calculer le premier instant conjugué revient à

trouver le premier zéro d'un déterminant, défini à partir des champs de Jacobi, le long de l'extrémale référence. Nous reprenons Fig. 2.2 l'exemple numérique du problème de Rayleigh dont le premier instant conjugué se trouve être le deuxième instants de commutation. Nous pouvons voir Fig. 2.2, que le calcul précis des équations variationnelles permet de retrouver ce résultat.

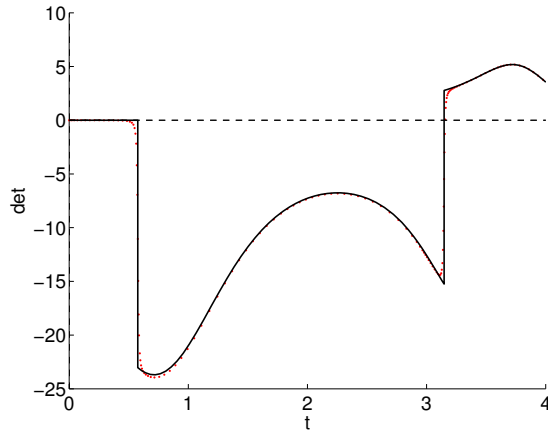


FIGURE 2.2 – Déterminant s'annulant au premier instant conjugué, en points rouges pour le régularisé en $\varepsilon = 0.01$, cf. Fig. 10 Réf. [ST10a] et en trait plein noir pour le problème de départ bang-bang.

2.2.3 Présentation des méthodes homotopiques

Nous présentons maintenant les méthodes homotopiques différentielles qui possèdent de multiples intérêts. La première utilisation possible vient en complément des méthodes de tir. Les méthodes de tir sont connues pour être extrêmement sensibles par rapport au point initial qui leur est donné. Ceci vient de l'algorithme de type Newton sous-jacent. Pour contourner cette difficulté, il peut être nécessaire de déformer le problème de départ en un problème plus simple à résoudre, en introduisant un paramètre scalaire λ tel que pour $\lambda = 0$, on doit résoudre le problème simple puis pour $\lambda = 1$, on retrouve celui de départ. L'idée est alors résoudre une série de problèmes de $\lambda = 0$ à $\lambda = 1$, pas à pas, en espérant trouver au final, une solution au problème de départ. Une autre utilisation complémentaire avec les méthodes de tir, vient du fait qu'il est obligatoire de connaître la structure du contrôle avant d'utiliser de telles méthodes. Il est alors envisageable d'introduire un paramètre $\lambda \in [0, 1]$, tel que pour $\lambda \in [0, 1]$, la structure soit connue tout en espérant que lorsque $\lambda \rightarrow 1$, la structure du problème de départ soit révélée. Enfin, le problème de contrôle optimal peut dépendre de paramètres physiques dont on aimerait connaître l'influence sur les solutions. Une homotopie sur ces paramètres

permettraient de calculer l'évolution des solutions en fonction de ceux-ci.

Méthode homotopique dans le cas lisse

Intéressons-nous maintenant à la famille à un paramètre de problèmes de contrôle optimal, paramétrisée par $\lambda \in [0, 1]$, présentée dans la section sur la méthode de tir simple 2.2.2. On définit, dans le cas à t_f fixé, la *fonction homotopique* h par

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

Si le temps final t_f est libre, alors la fonction h est remplacée par

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

Résoudre le problème pour n'importe quelle valeur de λ revient, dans les conditions de la section 2.2.3, à calculer le chemin de zéros reliant $\lambda_0 = 0$ à $\lambda_f = 1$. Pour cela, on doit intégrer le système suivant (paramétrisé par l'abscisse curviligne s)

$$r'(s) = T(r(s)), \quad r(0) = r_0 \in \{h = 0\}, \quad (2.7)$$

avec $' = d/ds$, $r = (z_0, \lambda)$ et où le vecteur tangent $T(r)$ est l'unique – à l'orientation près – vecteur unitaire du noyau de h' . Le compilateur `HAMPATH` fournit à partir de `hfun` et `efun`, une fonction *Matlab* `hampath` qui permet de faire le suivi de chemin en intégrant l'équation différentielle (2.7). Contrairement aux méthodes de Prédiction-Correction Réf. [AG03, WSM⁺97], on suit donc le chemin de zéros simplement par intégration du système différentiel en utilisant un schéma numérique d'ordre élevé (*dopri5*) sans faire aucune étape de correction. Le calcul de la grille d'intégration étant laissé à l'intégrateur numérique qui assure un maintien de l'erreur locale. Il est tout de même possible de combiner les méthodes `hampath` et `ssolve` pour faire des corrections lors du suivi de chemin. Le choix a été d'implémenter une méthode différentielle et non simpliciale car même si les méthodes simpliciales sont robustes, elles sont moins efficaces en général d'après Réf. [Mar05, Hab04]. Le point initial $r_0 = (z_0^0, \lambda_0)$ pouvant lui être obtenu grâce à `ssolve`. Les calculs des dérivées partielles de h par rapport à z_0 et t_f sont similaires à ceux pour la fonction de tir S_λ . La dérivée partielle par rapport au paramètre homotopique λ est donnée par

$$\frac{\partial h}{\partial \lambda}(z_0, \lambda) = \frac{\partial E}{\partial \lambda}(z_0, z(t_f, z_0, \lambda), \lambda) + \frac{\partial E}{\partial z_f}(z_0, z(t_f, z_0, \lambda), \lambda) \frac{\partial z}{\partial \lambda}(t_f, z_0, \lambda).$$

Les notations sont pour t_f fixé mais cela ne change pas le calcul pour t_f libre. Le calcul de $\partial_\lambda E$ est automatisé par `DA` tandis que $\partial_\lambda z(t_f, z_0, \lambda)$ est la solution en t_f des

équations variationnelles suivantes

$$\delta \dot{z} = \frac{\partial \vec{H}}{\partial z}(z(t), \lambda) \delta z + \frac{\partial \vec{H}}{\partial \lambda}(z(t), \lambda), \quad \delta z(0) = 0 \in \mathbb{R}^{2n},$$

où l'on utilise DA pour calculer $\partial_\lambda \vec{H}$ (comme pour \vec{H} et $\partial_z \vec{H}$). Il a noté que le calcul de toutes les dérivées variationnelles sont effectués simultanément car ce sont les calculs de dérivées les plus coûteux en terme de temps CPU. Le vecteur tangent $T(r(s))$ est obtenu par des calculs standards d'algèbre linéaire. On retrouve en effet le noyau de $h'(r(s))$ à l'aide d'une factorisation QR. On utilise pour cela la routine *dgeqrf* de la librairie *Lapack* Réf. [ABB⁺99]. En écrivant ${}^t h'(r(s)) = QR$, la dernière colonne de Q nous fournit le vecteur unitaire du noyau au signe près. L'orientation devrait être choisie telle que le déterminant suivant,

$$\det \begin{bmatrix} h'(r(s)) \\ {}^t T(r(s)) \end{bmatrix}$$

ait un signe constant, le long du chemin. Cependant, le signe change lorsque qu'on croise une singularité de type bifurcation Réf. [AG03]. On remplace donc ce critère de choix par le suivant. On choisit l'orientation du vecteur tangent de telle sorte que le produit scalaire entre deux vecteurs tangents successifs (dépendant de la grille de pas calculée par l'intégrateur) soit positif. Le premier étant choisi tel que $\lambda'(0) > 0$. De cette manière, une bifurcation peut exister si le signe du déterminant change. Un dernier point crucial dans le suivi de chemin est de pouvoir sortir de l'intégrateur lorsque la cible est atteinte. On ne connaît pas *a priori* la valeur de l'abscisse curviligne finale s_f telle que $\lambda(s_f) = \lambda_f$. On utilise donc la sortie dense de l'intégrateur *dopri5* au premier pas tel que $\lambda > 1$ afin de calculer par dichotomie la valeur de s_f .

Remarque 2.6. Pour la détection et localisation des bifurcations, il a été codé dans HAMPATH l'algorithme présenté au chapitre 8 Réf. [AG03].

Remarque 2.7. Il est possible de faire une homotopie sur le temps final t_f . Pour cela, on doit changer la paramétrisation du problème. La nouvelle variable de temps s est telle que $t = t_0 + (t_f - t_0)s = t_f s$, pour $t_0 = 0$ et t_f devient ainsi un nouveau paramètre. L'état x et le contrôle u fonction de s sont notés \tilde{x} , \tilde{u} respectivement et le problème de contrôle optimal est remplacé par le suivant

$$\begin{cases} \min g(t_f, \tilde{x}(1), \lambda) + \int_0^1 t_f f^0(s, \tilde{x}(s), \tilde{u}(s), \lambda) ds \\ \dot{\tilde{x}}(s) = t_f f(s, \tilde{x}(s), \tilde{u}(s), \lambda), \quad \tilde{u}(s) \in \mathcal{U}_\lambda \subset \mathbb{R}^m, \quad \lambda \in [0, 1], \quad s \in [0, 1] \\ \tilde{x}(0) \in X_{0,\lambda}, \quad \tilde{x}(1) \in X_{f,\lambda} \end{cases}$$

Méthode homotopique dans le cas non lisse

Reprenons maintenant le problème de contrôle 2.2.2 présenté précédemment, dans le cas d'une résolution par tir multiple. La fonction homotopique est alors définie par

$h(T, Z, \lambda) := S_\lambda(T, Z)$ et la dérivée partielle de h par rapport au paramètre homotopique est

$$\begin{aligned} \frac{\partial h}{\partial \lambda}(T, Z, \lambda) &= \frac{\partial E}{\partial \lambda}(T, Z, \exp Z, \lambda) \\ &+ \sum_{k=1}^N \frac{\partial E}{\partial e z_k}(T, Z, \exp Z, \lambda) \frac{\partial z}{\partial \lambda}(t_k, t_{k-1}, z_{k-1}, \lambda). \end{aligned}$$

La routine `hampath` permet de faire du suivi de chemin pour un problème défini par une fonction de tir multiple, cependant l'homotopie reste possible tant que la structure du problème ne change pas. À partir du moment où la structure du contrôle est modifiée, les inconnues de la fonction de tir ne vivent plus dans le même espace, la fonction doit donc être modifiée afin de poursuivre une nouvelle homotopie. Toutes les dérivées partielles de E sont calculées par DA, comme pour la fonction de tir. Enfin, la dérivée partielle par rapport au paramètre $\partial_\lambda z(t_k, t_{k-1}, z_{k-1}, \lambda)$, pour $k = 1, \dots, N$, est solution en t_k de

$$\delta \dot{z}(t) = \frac{\partial \vec{H}_{i_k}}{\partial z}(t, z(t, t_k, z_k, \lambda), \lambda) \delta z + \frac{\partial \vec{H}_{i_k}}{\partial \lambda}(t, z(t, t_k, z_k, \lambda), \lambda), \quad \delta z(t_k) = 0 \in \mathbb{R}^{2n}.$$

Remarque 2.8. Dans le cas d'un problème résolu par la méthode de tir simple avec détections des commutations, il est aussi possible de réaliser une homotopie, tant que la structure ne change pas. Toutes les données peuvent dépendre du paramètre homotopique λ y compris $\varphi(t, z, \lambda)$. L'équation (2.6) dont la condition initiale δz_0 est remplacée par 0, est légèrement différente dans ce cas puisque φ dépend directement de λ , elle devient donc

$$\delta z_2(\tau^+) = (I_{2n} + \alpha) \delta z_1(\tau) + \frac{\vec{H}_2(\tau^+, z_1, \lambda) - \vec{H}_1(\tau, z_1, \lambda)}{\frac{\partial \varphi}{\partial t}(\tau, z_1, \lambda) + \frac{\partial \varphi}{\partial z}(\tau, z_1, \lambda) \vec{H}_1(\tau, z_1, \lambda)} \frac{\partial \varphi}{\partial \lambda}(\tau, z_1, \lambda).$$

2.2.4 Synthèse

Le schéma 2.3 résume les fonctionnalités principales du package `HAMPATH`. L'utilisateur doit tout d'abord coder en *Fortran* les routines principales `efun` et `hfun`. Puis l'appel au compilateur `HAMPATH` fournit un ensemble de fonctions *Matlab* permettant la résolution de problèmes de contrôle optimal dépendant de paramètres, lisse ou non. L'interfaçage *Matlab* de routine *Fortran* fait de `HAMPATH` un code à la fois performant et simple d'utilisation. L'étape de compilation consiste principalement à produire l'ensemble des dérivées de premier et second ordre par DA pour dans un premier temps générer le gradient symplectique et ses dérivées, puis ensuite calculer les équations variationnelles nécessaires aux évaluations des dérivées. L'utilisation de schéma d'intégration d'ordre élevé est ensuite utilisé à la fois pour le suivi de chemin mais aussi pour le calcul du flot hamiltonien et des champs de Jacobi. En sortie du compilateur, on obtient la liste suivante de fonctions *Matlab*.

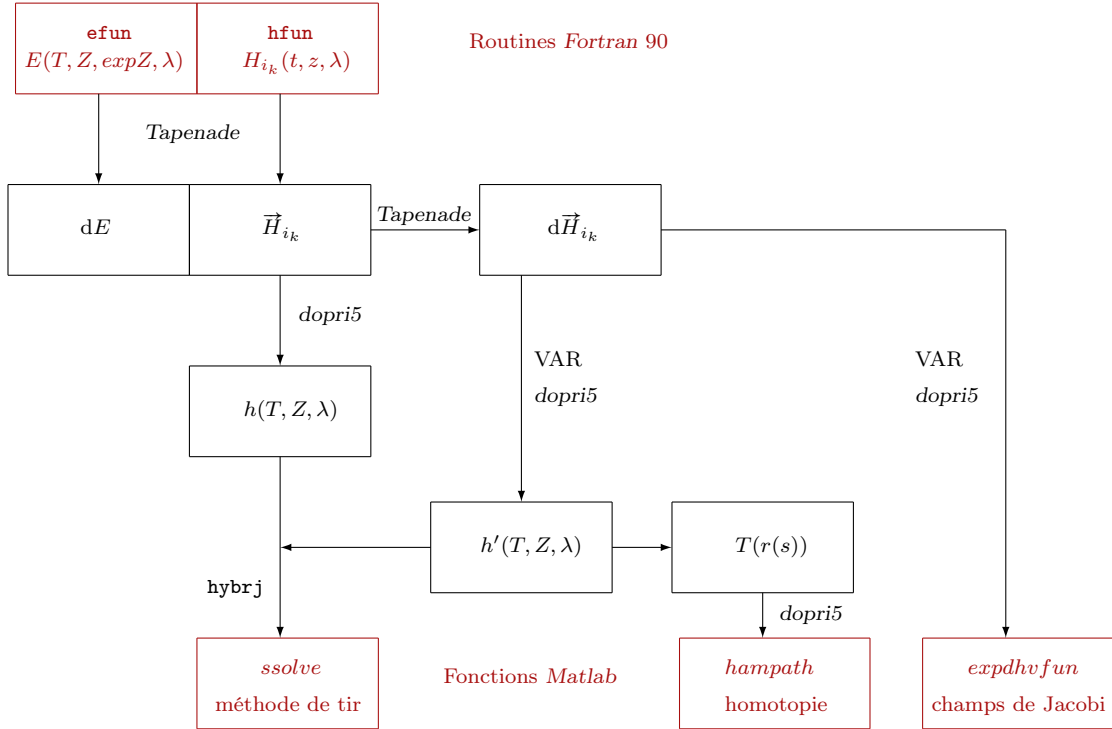


FIGURE 2.3 – Résumé du package HAMPATH.

`expdhvfun` intègre simultanément le système en z et son linéarisé pour le calcul des champs de Jacobi.

`exphvfun` intègre le système en z pour le calcul du flot hamiltonien.

`hampath` suit le chemin de zéros.

`hampathget` pour récupérer la valeur d'une ou plusieurs options.

`hampathset` pour définir les options du problème.

`hfun` donne la valeur de l'Hamiltonien.

`hvfun` donne la valeur du gradient symplectique.

`hybrd` est une interface à la routine fortran du même nom de la librairie *Minpack* qui permet la résolution de systèmes non linéaires sans fournir la jacobienne de la fonction. Le calcul de la jacobienne est approché par différences finies.

`hybrdget` pour récupérer la valeur d'une ou plusieurs options de `hybrd`.

`hybrdset` pour définir les options passées à `hybrd`.

`sfun` interface la fonction de tir.

`sjac` interface la jacobienne de la fonction de tir.

`ssolve` cherche un zéro de la fonction de tir, *i.e.* pour λ fixé. Typiquement, la routine est utilisée pour calculer la condition initiale du suivi de chemin.

Remarque 2.9. La liste des options disponibles pour l'ensemble des fonctions se trouvent dans le manuel téléchargeable à l'adresse présente Réf. [CCG10]. On en retiendra pour la suite que quelques-unes parmi elles. Les premières options importantes, sont les tolérances absolue et relative passées en paramètre de *dopri5* pour le calcul des équations variationnelles et du flot hamiltonien. Celles-ci doivent être en accord avec les tolérances absolu et relative pour le suivi de chemin. Il en effet recommandé de faire un suivi de chemin moins précis que le calcul de la fonction homotopique et de ses dérivées. De plus, en jouant sur les tolérances de la continuation différentielle, il est possible de trouver un équilibre entre temps de calculs et précision du suivi, sachant que pour beaucoup de cas, un suivi suffisamment précis est un suivi tel que la solution finale fasse converger la méthode de tir. Nous mentionnerons aussi deux autres options très utilisées dans le chapitre 3. Les deux options permettent l'interruption de l'homotopie sous certaines conditions. La première est un seuil tel que la continuation s'arrête si la norme de la fonction de tir dépasse ce seuil durant le suivi. Enfin, la dernière option est une tolérance telle que si les dix derniers pas sont deux à deux trop proches en erreur relative, alors l'homotopie s'arrête.

2.3 Exemples de validation

Exemple 1 : Contrôle quantique

On s'intéresse au problème de minimisation de l'énergie pour un système quantique à deux niveaux d'énergie Réfs. [BCC11, BCS11, BCSS10]. Il consiste en la minimisation de la norme L^2 du contrôle pour un temps de transfert t_f fixé, lors d'un déplacement d'un état initial q_0 vers un état final q_1 . L'état est $q = (x, y, z) \in \mathbb{R}^3$ et la dynamique est donnée par le système contrôlé

$$\begin{aligned}\dot{x} &= \Gamma x + u_2 z, \\ \dot{y} &= -\Gamma y - u_1 z, \\ \dot{z} &= \gamma_- - \gamma_+ z + u_1 y - u_2 x.\end{aligned}$$

Ce système est déduit des équations de Kossakowski–Lindblad décrivant la dynamique de systèmes quantiques dissipatifs à deux niveaux d'énergie pour le contrôle de la rotation de molécule. Après normalisation, il correspond aux équations de Bloch intervenant en Résonance Magnétique Nucléaire (RMN), lorsque le terme de detuning est nul. Les paramètres dissipatifs satisfont la contrainte $2\Gamma \geq \gamma_+ \geq |\gamma_-|$, et le contrôle est la fonction complexe $u = u_1 + iu_2$ modélisant l'action d'un champ magnétique. Le coût correspond à l'énergie dépensée lors du transfert qui est un critère physique naturel et important. La boule de Bloch $|q| \leq 1$, qui est l'espace d'état physique du système, est invariant pour la dynamique. Un tel problème de contrôle est d'intérêt pour deux projets récents de recherche. Le premier concerne le contrôle de la rotation d'une molécule

en phase gazeuse et le second concerne le contrôle de la dynamique de particule de spin 1/2 pour la RMN.

Si on utilise les coordonnées sphériques $x = \rho \sin \phi \cos \theta$, $y = \rho \sin \phi \sin \theta$, $z = \rho \cos \phi$, les équations d'état deviennent

$$\begin{aligned}\dot{\rho} &= \gamma_- \cos \phi - \rho(\delta \cos^2 \phi + \Gamma), \\ \dot{\theta} &= -v_1 \cot \phi, \\ \dot{\phi} &= -\frac{\gamma_- \sin \phi}{\rho} + \delta \sin \phi \cos \phi + v_2,\end{aligned}$$

où $\delta = \gamma_+ - \Gamma$ et le nouveau contrôle est $v = e^{i\theta}u = v_1 + iv_2$. Il est à noter, qu'en particulier, le coût est invariant par ce feedback puisque

$$\int_0^{t_f} (v_1^2 + v_2^2) dt = \int_0^{t_f} (u_1^2 + u_2^2) dt.$$

L'état initial et l'état final sont ici $(\rho(0), \theta(0), \phi(0)) = (1, 0, \pi/4)$ et $(\rho(t_f), \theta(t_f), \phi(t_f)) = (0.3534, 2.053, 0.6004)$. Le temps final est fixé à $t_f = 0.5$. Les paramètres γ_+ et γ_- valent respectivement 2 et 0.1, et nous sommes intéressés ici par l'évolution de la solution lorsque le paramètre Γ décroît de 3 à 2. Le chemin de zéros correspondant est affiché Fig. 2.4. Les contrôles optimaux et les trajectoires optimales pour des valeurs intermédiaires de Γ sont représentés Figs. 2.5 et 2.6. Les conditions suffisantes du deuxième ordre sont vérifiées par un test de rang sur les champs de Jacobi le long des extrémals références, voir Fig. 2.7, assurant que l'on obtient des solutions \mathcal{C}^0 -localement optimales pour le problème pour toutes les valeurs possibles du paramètre homotopique.

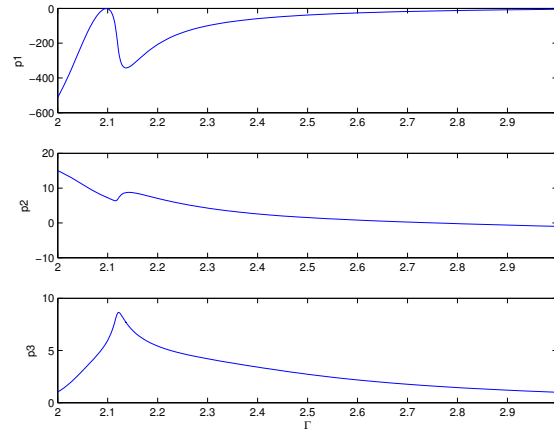


FIGURE 2.4 – Minimisation de l'énergie en contrôle quantique, chemin de zéros. L'état adjoint initial $p_0 \in (\mathbb{R}^3)^*$ solution de la fonction de tir est calculé lorsque le paramètre homotopique Γ décroît de 3 vers 2.

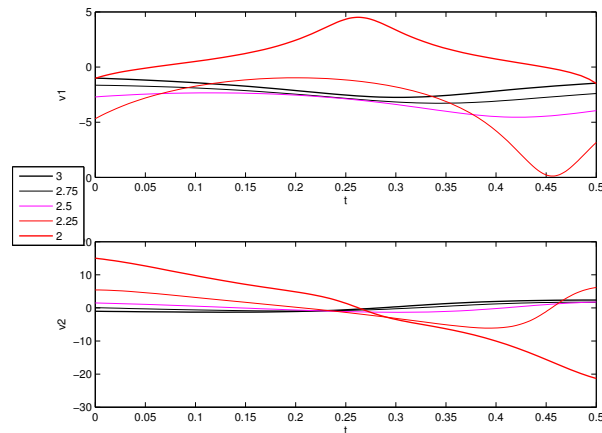


FIGURE 2.5 – Minimisation de l'énergie en contrôle quantique, contrôles. Les deux composantes des contrôles pour $\Gamma = 3, 2.75, 2.5, 2.25$ et 2 sont présentées, illustrant un changement de stratégie lorsque le paramètre décroît.

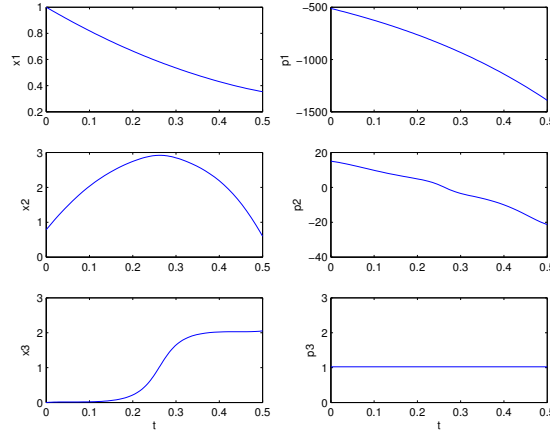


FIGURE 2.6 – Minimisation de l'énergie en contrôle quantique, trajectoires. Les trajectoires optimales dans la boule de Bloch sont projetées sur les plans (x, z) (sous-graphe du haut) et (y, z) (sous-graphe du bas) pour $\Gamma = 3, 2.75, 2.5, 2.25$ et 2 .

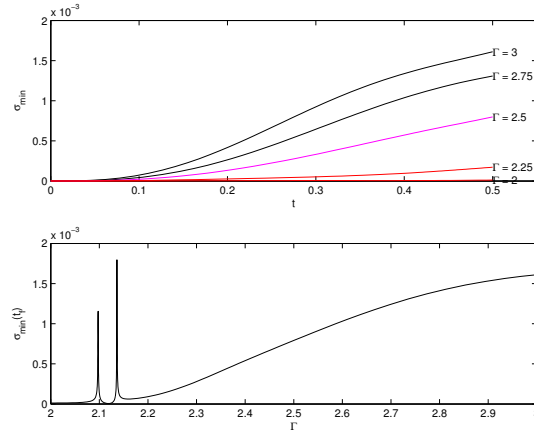


FIGURE 2.7 – Minimisation de l'énergie en contrôle quantique, conditions du deuxième ordre. Le long de chaque extrémale pour $\Gamma = 3, 2.75, 2.5, 2.25$ et 2 , trois champs de Jacobi sont calculés et le rang de $\{\delta x^1(t), \delta x^2(t), \delta x^3(t)\}$ est évalué par SVD. L'évolution de la plus petite des valeurs singulières σ_3 est affichée dans chacun des cas (sous-graphe du haut). Une vérification poussée montre qu'elle reste positive sur $]0, t_f]$ (même au voisinage de $\Gamma = 2.1$), donc les conditions suffisantes du deuxième ordre s'appliquent et assurent la \mathcal{C}^0 -optimalité locale. L'évolution de $\sigma_3(t_f)$ le long du chemin, directement connectée au test de rang de l'homotopie est aussi donné (sous-graphe du bas).

Exemple 2 : Problème de transfert orbital

Motivé par des problèmes de transfert orbital de satellites en mécanique spatiale Réfs. [BBDHM88, OT97], on étudie l'équation contrôlée du problème aux deux corps

$$\ddot{r}(t) = -\mu \frac{r(t)}{|r(t)|^3} + \frac{\varepsilon u(t)}{m}, \quad |u| \leq 1.$$

Le vecteur position r est dans \mathbb{R}^3 et on se restreint aux orbites elliptiques sans collision,

$$r \times \dot{r} \neq 0, \quad \dot{r}^2 < \frac{2\mu}{|r|},$$

qui définit la variété à six dimensions où vit l'état du système. Le contrôle u est limité à la sphère unité, $u_1^2 + u_2^2 + u_3^2 \leq 1$, et $\varepsilon u/m$, où m est la masse du deuxième corps, modélise l'accélération possible. Typiquement, εu est la poussée de l'engin dans le champ central d'une planète (le premier corps) dont la constante de gravitation est μ . Pour de petit ε , la trajectoire est une perturbation du mouvement képlérien intégrable. L'étude porte sur le transfert d'un satellite autour de la Terre. Pour des poussées faibles, le transfert nécessite beaucoup de révolutions autour du corps primaire, ceci induit de fortes oscillations de l'état en coordonnées cartésiennes. C'est pourquoi il est préférable d'utiliser le système correspondant aux intégrales premières du mouvement képlérien non perturbé. Ce système remplace les coordonnées cartésiennes par les éléments orbitaux décrivant l'orbite osculatrice du satellite, c'est à dire l'orbite que décrirait le satellite si on le laissait évoluer librement (sans lui appliquer de poussée). Le *paramètre* P et l'*eccentricité* e nous donne la forme de l'ellipse. Les trois angles d'Euler, Ω (*longitude du noeud ascendant*), i (*l'inclinaison* du plan orbital par rapport au plan équatorial), ω (*l'argument du périégée*), nous donnent la position de l'orbite par rapport au repère terrestre. Enfin, l'*anomalie vraie* ν indique la position du satellite par rapport au périégée de l'orbite. On obtient ainsi un ensemble complet de coordonnées, cf. Fig. 2.8. Notre orbite terminale

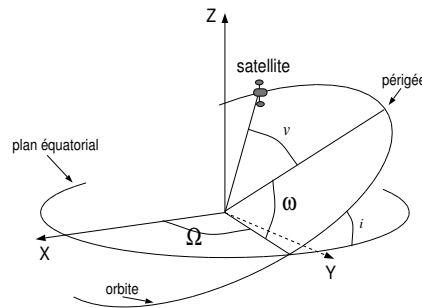


FIGURE 2.8 – Eléments orbitaux.

étant l'orbite géostationnaire équatoriale (qui est circulaire) certains de ces paramètres

$(\nu, \omega$ et $\Omega)$ ne sont plus définis à la fin du transfert. C'est pourquoi nous utilisons les éléments orbitaux modifiés $x = (P, e_x, e_y, h_x, h_y, l)$ tels que :

$$\begin{cases} e_x &= e \cos(\omega + \Omega) \\ e_y &= e \sin(\omega + \Omega) \\ h_x &= \tan\left(\frac{i}{2}\right) \cos(\Omega) \\ h_y &= \tan\left(\frac{i}{2}\right) \sin(\Omega) \\ l &= \nu + \omega + \Omega \end{cases}$$

où $e = (e_x, e_y)$ est le vecteur excentricité, $h = (h_x, h_y)$ est le vecteur inclinaison et L est la longitude cumulée. En plus du passage aux coordonnées de Gauss (les éléments orbitaux modifiés), on va changer le repère dans lequel est exprimé le contrôle u . En effet, l'expression du contrôle dans le repère inertiel terrestre n'est, avec nos nouveaux paramètres, pas très parlante. On choisit donc de l'exprimer dans le repère mobile $(q, s, w) = \left(\frac{r}{|r|}, w \wedge q, \frac{r \wedge v}{|r \wedge v|}\right)$ attaché au satellite (cf. Fig. 2.9). Dans ces coordonnées, la

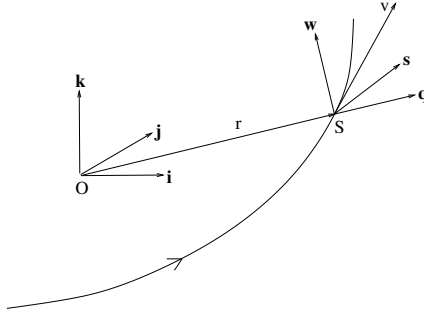


FIGURE 2.9 – Repère ortho-radial.

dynamique s'écrit

$$\dot{x}(t) = F_0(x(t)) + \frac{\varepsilon}{m} \sum_{i=1}^3 u_i(t) F_i(x(t))$$

avec

$$\begin{aligned} F_0(x) &= \sqrt{\frac{\mu}{P}} \frac{W^2}{P} \frac{\partial}{\partial l}, \\ F_1(x) &= \sqrt{\frac{P}{\mu}} \left(\sin l \frac{\partial}{\partial e_x} - \cos l \frac{\partial}{\partial e_y} \right), \\ F_2(x) &= \sqrt{\frac{P}{\mu}} \left(\frac{2P}{W} \frac{\partial}{\partial P} + \left(\cos l + \frac{e_x + \cos l}{W} \right) \frac{\partial}{\partial e_x} + \left(\sin l + \frac{e_y + \sin l}{W} \right) \frac{\partial}{\partial e_y} \right), \\ F_3(x) &= \sqrt{\frac{P}{\mu}} \left(-\frac{Z e_y}{W} \frac{\partial}{\partial e_x} + \frac{Z e_x}{W} \frac{\partial}{\partial e_y} + \frac{C \cos l}{2W} \frac{\partial}{\partial h_x} + \frac{C \sin l}{2W} \frac{\partial}{\partial h_y} \right), \end{aligned}$$

et

$$W = 1 + e_x \cos l + e_y \sin l, \quad Z = h_x \sin l - h_y \cos l, \quad C = 1 + h_x^2 + h_y^2.$$

La fonction coût est la norme L^1 du contrôle,

$$\int_0^{t_f} |u(t)| dt \rightarrow \min, \quad |u(t)| = \sqrt{u_1(t)^2 + u_2(t)^2 + u_3(t)^2},$$

à temps final t_f libre. Ceci modélise la consommation de carburant (avec l'approximation ici que la masse m reste constante) qui est bien plus complexe qu'un coût en norme L^2 comme le montre l'application du Principe du Maximum de Pontryagin.

Le Hamiltonien normal a maximisé (le cas anormal est éliminé ici, voir Réf. [GH06], donc on peut fixé $p^0 = -1$) est

$$H(x, u, p) = -|u| + H_0(x, p) + \frac{\varepsilon}{m} \sum_{i=1}^3 u_i H_i(x, p)$$

où chaque $H_i(x, p) = pF_i(x)$ est le relèvement hamiltonien du champ de vecteur correspondant. Définissons les deux fonctions de commutations

$$\psi(x, p) = (H_1, H_2, H_3)(x, p), \quad \varphi(x, p) = -1 + \frac{\varepsilon}{m} |\psi(x, p)|.$$

Sur les sous-ensembles ouverts et denses $\psi \neq 0$, le maximiseur de $H(x, \cdot, p)$ sur la boule euclidienne unité est

$$u = \frac{\psi}{|\psi|} \quad \text{quand } \varphi > 0, \quad u = 0 \quad \text{quand } \varphi < 0,$$

et arbitraire si φ s'annule. Par conséquent, la norme du contrôle est bang-bang (égale à 0 ou 1), et le problème est très difficile à résoudre sans connaissance *a priori* sur la structure de commutations Réf. [MG07]. On propose donc une pénalisation intérieure standard en utilisant une barrière logarithmique Réfs. [BBLV⁺05, BE02] pour éliminer simultanément l'absence de régularité en raison du bord non-vide du domaine du contrôle ($|u| = 1$) et de la non-différentiabilité de l'intégrande du coût en $u = 0$. Pour $\alpha \in [0, 1]$, on considère le coût

$$\int_0^{t_f} [|u| - (1 - \alpha) \ln |u| - (1 - \alpha) \ln(1 - |u|)] dt$$

pour u dans la boule unité pointée, $0 < |u| < 1$. On combine de plus cette approche avec une deuxième perturbation en mettant

$$\int_0^{t_f} \{(1 - \beta) + \beta[|u| - (1 - \alpha) \ln |u| - (1 - \alpha) \ln(1 - |u|)]\} dt.$$

Lorsque β est zéro, le coût est t_f et on a le problème à temps minimal qui est bien plus simple et longuement étudié Réf. [CGN03]. Pour $\beta = 1$ et $\alpha = 1$ le problème original est retrouvé, tandis que pour $\beta \in [0, 1]$ and $\alpha < 1$, nous sommes dans le cas régulier présenté en §1.2.1 et le contrôle u , $0 < |u| < 1$, est ici donné par

$$u(x, p, \alpha, \beta) = \mu(\varphi(x, p, \beta), \alpha, \beta) \frac{\psi(x, p)}{|\psi(x, p)|},$$

où

$$\mu(\varphi(x, p, \beta), \alpha, \beta) = \frac{1}{2\varphi(x, p, \beta)} \left(\varphi(x, p, \beta) - 2\beta(1 - \alpha) + \sqrt{\varphi(x, p, \beta)^2 + 4\beta^2(1 - \alpha)^2} \right)$$

et

$$\varphi(x, p, \beta) = -\beta + \frac{\varepsilon}{m} |\psi(x, p)|$$

Une autre approche consisterait à résoudre directement le problème cible. Bien qu'il existe des conditions du second ordre qui traitent les contraintes sur le contrôle et l'état Réf. [MM96], ceci aurait deux inconvénients pour nous. Premièrement, on doit deviner le nombre et le lieu des points de jonction avec les bords des contraintes (tandis que suivre le chemin permet numériquement de capturer la structure comme il est illustré Fig. 2.11). De plus, ces points de jonction deviennent de nouvelles inconnues du problème, rendant la résolution d'autant plus difficile (pour des poussées faibles, c'est à dire pour de petits ε , il y a des centaines de jonctions). Plutôt que de faire une homotopie après l'autre, on les combine en une seule continuation $\lambda \mapsto (\alpha(\lambda), \beta(\lambda))$. La question sur la convergence quand $\alpha \rightarrow 1$ est une difficulté dont quelques idées peuvent être trouvées dans la littérature (voir par exemple, Réfs. [ST10b, VM06]). Voir aussi Réfs. [GH06, HMG04] pour des résultats sur ce problème via une homotopie différente.

Les résultats présentés ici résolvent un problème originalement posé par l'Agence Spatiale Française (CNES). Un satellite de masse $m = 1500$ Kg autour de la Terre ($\mu = 398600.47 \text{ km}^3\text{s}^{-2}$) doit être transféré d'une orbite initiale basse, excentrique et inclinée vers l'orbite géostationnaire dans le plan équatorial, en utilisant une poussée maximale de $\varepsilon = 10$ Newtons. Dans notre système de coordonnées,

$$\begin{aligned} P_0 &= 11625 \text{ Km}, & e_{x0} &= 0.75, & e_{y0} &= 0, & h_{x0} &= 0.612, & h_{y0} &= 0, & l_0 &= \pi \text{ rad}, \\ P_f &= 42165 \text{ Km}, & e_{xf} &= 0, & e_{yf} &= 0, & h_{xf} &= 0, & h_{yf} &= 0, & l_f &= 56 \text{ rad}. \end{aligned}$$

Les simulations numériques sont exposées pour λ entre 0 et $1 - 1e^{-9}$. Le chemin de zéros correspondant est présent Fig. 2.10. Les contrôles optimaux pour des valeurs intermédiaires de λ (proche de 0, ou proche 1) sont représentées Fig. 2.11. La trajectoire pour $\lambda = 1 - 1e^{-9}$ est affichée Fig. 2.12. Les conditions suffisantes du deuxième ordre sont vérifiées par un test de rang sur les champs de Jacobi le long des extrémals, voir Fig. 2.13, assurant que l'on obtient des solutions \mathcal{C}^0 -localement optimales pour $\lambda < 1$.

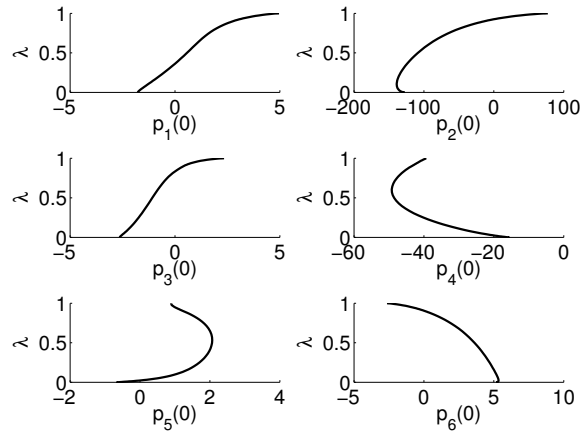


FIGURE 2.10 – Chemin de zéros pour la minimisation L^1 du problème de contrôle aux deux corps. L'état adjoint initial $p_0 \in (\mathbb{R}^6)^*$ solution de la fonction de tir est calculé lorsque le paramètre homotopique tend vers 1.

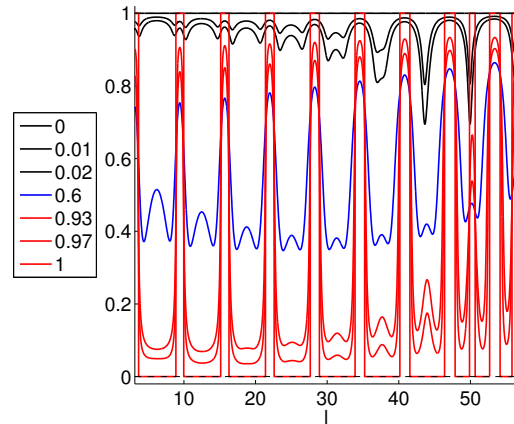


FIGURE 2.11 – Normes des contrôles pour la minimisation L^1 du problème de contrôle aux deux corps. La norme du contrôle en trois dimensions en fonction de la longueur (la longueur finale est fixée tandis que le temps final est libre) est présentée pour λ proche de 0, $\lambda = 0.6$, et λ proche de 1. Pour $\lambda = 0$, le problème à temps minimal est résolu et $|u| = 1$ partout Réf. [CGN03]. Inversement, pour λ proche de 1, la structure de commutations a été capturée et des quasi-commutations entre 0 et 1 sont observées sur la norme.

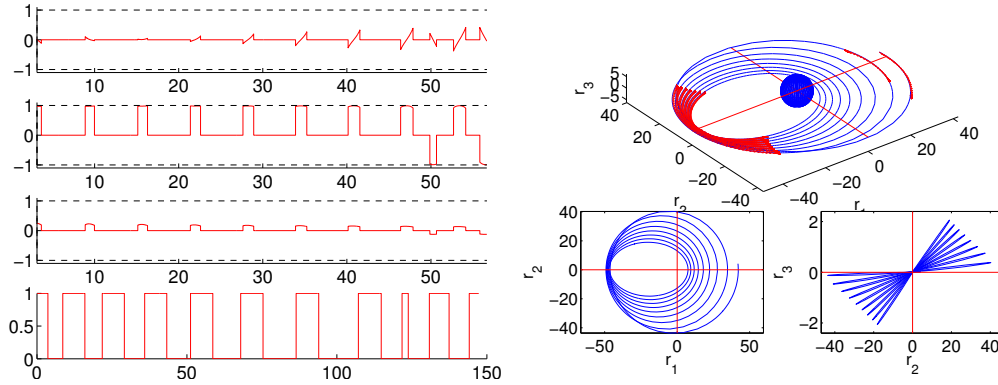


FIGURE 2.12 – Contrôle en 3D (sous-graphe de gauche) et trajectoire optimale (sous-graphe de droite) pour la minimisation L^1 du problème de contrôle aux deux corps. Le contrôle est donné en fonction du temps pour les trois composantes u_1 , u_2 , u_3 et la norme $|u|$, respectivement de haut en bas. La trajectoire (en bleu) autour de la terre est présentée pour $\lambda = 1 - 1e^{-9}$, en trois dimensions (sous-graphe du haut), les projections sur (r_1, r_2) et (r_2, r_3) (sous-graphes du bas). Les flèches rouges montrent le contrôle en trois dimensions. L'action du contrôle est clairement localisée autour des apogées et les deux derniers périgées.

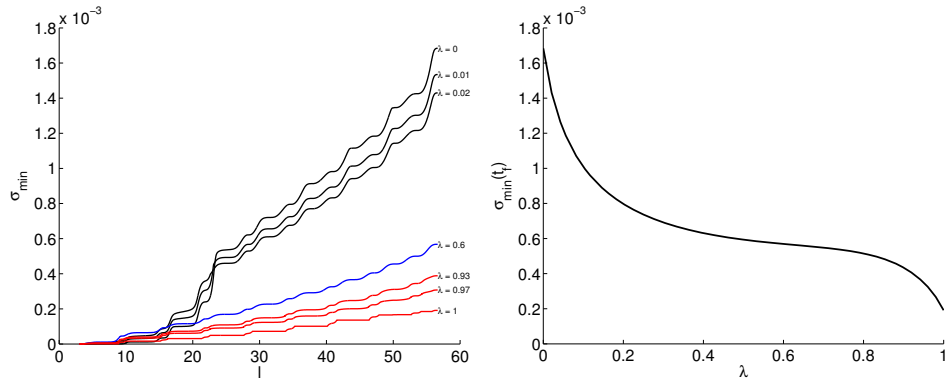


FIGURE 2.13 – Vérification des conditions du deuxième ordre pour la minimisation L^1 du problème de contrôle aux deux corps. Le long de chaque extrémale pour les valeurs précédentes de λ , six champs de Jacobi sont calculés et le rang de $\{\delta x^1(t), \dots, \delta x^6(t)\}$ est évalué par SVD. L'évolution de la plus petite des valeurs singulières σ_6 en fonction de la longitude est affichée dans chacun des cas (sous-graphe de gauche). Puisqu'elle reste positive sur $]0, t_f(\lambda)]$, les conditions suffisantes du deuxième ordre assure la \mathcal{C}^0 optimalité locale. L'évolution de $\sigma_6(t_f)$ le long du chemin, directement connecté à la condition de rang de l'homotopie, est aussi donné (sous-graphe de droite).

CHAPITRE 3

Application au problème de contraste en imagerie médicale

Dans ce chapitre, on étudie un problème intervenant en imagerie médicale, qui consiste à maximiser le contraste d'images obtenues par des techniques de Résonance Magnétique Nucléaire (RMN). Ce problème s'inscrit dans un cadre plus général qui sera évoqué en premier lieu. Par la suite, les difficultés mathématiques et numériques seront présentées et nous verrons comment, au moyen des outils géométrique et algorithmique des chapitres précédents, nous pourrons commencer à mieux comprendre les multiples possibilités inhérentes au problème de contraste. La majorité de ce chapitre peut être retrouvée dans Réfs. [BC12, BCG⁺12].

3.1 Présentation du problème de contraste

Introduction

Les techniques de contrôle optimal ont été utilisées très récemment en RMN, par exemple, pour le contrôle de la dynamique de systèmes quantiques, voir Réf. [KGB05]. Le modèle de départ vient des équations suivantes introduites par F. Bloch en 1946, permettant de contrôler le moment magnétique d'un système.

$$\begin{aligned}
 \frac{dM_x}{dt} &= -\frac{M_x}{T_2} - \Delta\omega M_y + \omega_y M_z \\
 \frac{dM_y}{dt} &= -\frac{M_y}{T_2} + \Delta\omega M_x - \omega_x M_z \\
 \frac{dM_z}{dt} &= \frac{(M_0 - M_z)}{T_1} - \omega_y M_x + \omega_x M_y,
 \end{aligned} \tag{3.1}$$

où $M = (M_x, M_y, M_z)$ est le vecteur de magnétisation, M_0 représente l'état d'équilibre thermodynamique du système selon l'axe z , T_1, T_2 sont les *temps de relaxation* (temps de retour à l'équilibre) qui caractérisent la particule, $\Delta\omega$ est le *detuning* et $\omega = (\omega_x, \omega_y)$, $|\omega| \leq \omega_{max}$, est le champ transverse de contrôle, dans le plan (x, y) .

Le modèle du problème de contraste en imagerie, étudié dans ce manuscrit, est un système composé de deux équations de Bloch (3.1) avec pour chacune un detuning nul

52 Chapitre 3. Application au problème de contraste en imagerie médicale

(voir Réf. [Lap11] pour plus de détails sur le rôle du detuning). Les temps de relaxation des deux sous-systèmes sont différents et représentent deux types de particules de spin $1/2$. L'ensemble du système est contrôlé par le même champ magnétique. Partant de l'état d'équilibre pour les deux spins, le problème de contrôle optimal consiste à amener la magnétisation de la première particule à zéro tout en maximisant l'amplitude du vecteur de magnétisation de la seconde.



FIGURE 3.1 – (GAUCHE) Solution témoin. (DROITE) Solution optimale.

La figure 3.1 illustre le problème de contraste à partir d'expériences réalisées dans le laboratoire de l'université de Munich par l'équipe de S. Glaser. Sur la figure, deux expériences ont été réalisées dans les mêmes conditions. L'échantillon est constitué d'un petit tube contenant du sang oxygéné qui est plongé dans un tube ayant un diamètre plus grand dans lequel se trouve du sang désoxygéné (ou du moins, des produits ayant les mêmes caractéristiques physiques). Le but étant à partir de l'image, de pouvoir distinguer le plus clairement possible les deux liquides. Ces expériences ont été réalisées en laboratoire et servent à mettre en évidence le principe du problème de contraste. Dans la pratique, les différentes particules baignent dans le même environnement. On remarque qu'à gauche, le contraste entre l'échantillon intérieur et extérieur est faible ce qui ne permet pas de les différencier. A droite la solution est meilleure, au centre l'image est noire (la magnétisation du premier spin vaut 0) tandis qu'elle est plus claire à l'extérieure (l'amplitude du vecteur magnétique est maximisée). Il faut noter que dans le bas de l'anneau extérieur, il y a quelques arcs noirs résiduels, provenant de l'inhomogénéité du champ de contrôle. Cette inhomogénéité devrait être pris en compte en pratique, ce qui reviendrait à tenir compte du detuning. On peut se référer à Réf. [Lap11] pour une plus grande explication de l'expérimentation et des difficultés liées à celle-ci. Un fait important est que les contrôles optimaux théoriques peuvent être implémentés très précisément avec des spectromètres modernes en RMN et donc la différence entre la théorie et la pratique est très faible.

Modélisation du problème de contraste

Le système (3.1) peut se réécrire dans un système de coordonnées normalisées $q = (x, y, z) = (M_x, M_y, M_z)/M_0$. Dans ces coordonnées, le point d'équilibre de la dérive se situe au pôle nord $(0, 0, 1)$ et le contrôle normalisé est $u = (u_x, u_y) = \frac{2\pi}{\omega_{\max}}(\omega_x, \omega_y)$ et la contrainte sur le contrôle devient $|u| \leq M$ avec $M = 2\pi$. Le temps normalisé est donné par $\tau = t\omega_{\max}/2\pi$. En utilisant la normalisation, le problème de contraste composé de deux systèmes de spin 1/2 sans detuning, couplé par le même contrôle, est décrit pour $i = 1, 2$ par :

$$\begin{aligned}\dot{x}_i &= -\Gamma_i x_i + u_y z_i \\ \dot{y}_i &= -\Gamma_i y_i - u_x z_i \\ \dot{z}_i &= \gamma_i(1 - z_i) + (u_x y_i - u_y x_i),\end{aligned}\tag{3.2}$$

où $\Gamma_i = 2\pi/(\omega_{\max}T_{i2})$, $\gamma_i = 2\pi/(\omega_{\max}T_{i1})$ et $\omega_{\max}/2\pi$ peut être choisi jusqu'à 15000 Hz, cependant la valeur 32.3 Hz est choisie pour la suite. Quatre cas particuliers, dont les temps de relaxation sont donnés Table 3.1, sont considérés dans les sections suivantes. Le premier est le couple liquide cérébrospinal/eau pour étudier le cerveau. Le second est le couple sang désoxygéné/oxygéné. Il permet de différencier le système artériel du système veineux. Le troisième couple est constitué de la matière grise cérébrale et de la matière blanche cérébrale encore une fois pour l'étude du cerveau. Le dernier cas est celui de l'eau et de la graisse, par exemple, pour détecter des dépôts de graisse anormaux dans le corps du patient.

1. Liquide cérébrospinal	: $T_1 = 2000$ ms,	$T_2 = 200$ ms
Eau	: $T_1 = 2500$ ms,	$T_2 = 2500$ ms
2. Sang désoxygéné	: $T_1 = 1350$ ms,	$T_2 = 50$ ms
Sang oxygéné	: $T_1 = 1350$ ms,	$T_2 = 200$ ms
3. Matière grise cérébrale	: $T_1 = 920$ ms,	$T_2 = 100$ ms
Matière blanche cérébrale	: $T_1 = 780$ ms,	$T_2 = 90$ ms
4. Eau	: $T_1 = 2500$ ms,	$T_2 = 2500$ ms
Gras	: $T_1 = 200$ ms,	$T_2 = 100$ ms

TABLE 3.1 – Temps de relaxation

On note $q_1 = (x_1, y_1, z_1)$, $q_2 = (x_2, y_2, z_2)$ les vecteurs représentant chaque spin, la boule de Bloch $|q_i| \leq 1$ est invariante pour la dynamique puisque les paramètres satisfont la contrainte $2\Gamma_i \geq \gamma_i$, le problème de contrôle optimal est le suivant : partant du pôle nord $N = ((0, 0, 1), (0, 0, 1))$, le but est d'atteindre en un temps fixé t_f , l'état final $q_1(t_f) = 0$, tout en maximisant la norme au carré du second spin $|q_2(t_f)|^2$. On introduit le système sous la forme : $\dot{q} = f(q, u)$, où $q = (q_1, q_2) \in \mathbb{R}^n$ est tel que $|q_i| \leq 1$, $|u| \leq M$, formé par le couplage des deux équations (3.2), avec pour conditions

54 Chapitre 3. Application au problème de contraste en imagerie médicale

initiales $b_0(q(0)) = q(0) = N$ et terminales $b_f(q(t_f)) = q_1(t_f) = 0$, et la fonction coût $c(q(t_f)) = -|q_2(t_f)|^2$. Le problème de contraste est donc un problème standard de Mayer. Le point de vue géométrique est le suivant. On note $\mathcal{U} = L^\infty([0, t_f], \mathbf{U})$ avec \mathbf{U} la boule fermée de rayon $M = 2\pi$. On note $q(t, q_0, u)$ la trajectoire partant de q_0 et associée à u , $A(q_0, t_f) = \bigcup_{u(\cdot) \in \mathcal{U}} q(t, q_0, u)$ l'ensemble accessible au temps t_f et si on introduit la variété $C_m = \{q \in \mathbb{R}^n, b_f(q) = 0, c(q) = m\}$ où m est un paramètre, alors un contrôle optimal \bar{u} est tel que $\bar{q}(t_f) = q(t_f, \bar{u})$ appartient à la frontière de $A(q_0, t_f)$, $b_f(\bar{q}(t_f)) = 0$ et m est minimum.

Réduction au cas mono-entrée

Pour le problème de contraste, il est crucial de parler tout d'abord du problème où l'on se restreint à seul spin dont l'état est noté $q = (x, y, z)$ et les paramètres de relaxation sont (γ, Γ) . Le problème de contrôle en temps minimal pour un système quantique dissipatif à deux niveaux d'énergie, décrit par les équations de Lindblad, plus génériques que les équations de Bloch (3.2), est étudié dans Réfs. [BCS09, BS09]. On rappelle un résultat important sur l'analyse géométrique des équations de Lindblad, valable pour les équations de Bloch. Si on applique au système (3.2) un changement de coordonnées sur q défini par une rotation d'angle θ autour de l'axe z :

$$\begin{aligned} X &= x \cos \theta + y \sin \theta \\ Y &= -x \sin \theta + y \cos \theta \\ Z &= z, \end{aligned}$$

et une transformation feedback similaire sur le contrôle :

$$v_1 = u_x \cos \theta + u_y \sin \theta, \quad v_2 = -u_x \sin \theta + u_y \cos \theta,$$

on obtient le système :

$$\begin{aligned} \dot{X} &= -\Gamma X + v_2 Z \\ \dot{Y} &= -\Gamma Y - v_1 Z \\ \dot{Z} &= \gamma(1 - Z) + (v_1 Y - v_2 X). \end{aligned}$$

Ceci définit donc un groupe de symétries de dimension un et par construction $|u| = |v|$. On en déduit donc que le problème de contrôle en temps minimal est invariant pour une telle action. En utilisant les coordonnées cylindriques :

$$x = r \cos \theta, \quad y = r \sin \theta, \quad z = z$$

et les variables duales $p = (p_r, p_\theta, p_z)$, le Hamiltonien vrai H_r prend la forme :

$$H_r = -\Gamma r p_r + (z^2 p_r^2 + \frac{z^2}{r^2} p_\theta^2 + r^2 p_z^2 - 4r z p_r p_z)^{1/2}.$$

Proposition 3.1. *Pour le problème de contrôle en temps minimal à un seul spin, vérifiant les équations (3.2), la variable θ est une coordonnée cyclique et p_θ est une intégrale première de la dynamique. Le signe de $\dot{\theta}$ est donné par p_θ et si $p_\theta = xp_y - yp_x = 0$ alors θ est constante. La synthèse des extrémales pour un point initial sur l'axe z est à une rotation près donnée par la synthèse dans le plan $\theta = 0$. A une rotation près, le contrôle u peut lui aussi être restreint au contrôle scalaire $(u_x, 0)$.*

Le problème de contrôle à seul spin en temps minimal pour des trajectoires partant du pôle nord, peut être réduit au cas 2-dimensionnel $x = 0$ pour lequel le contrôle est restreint au champ scalaire $u_y = 0$. Ce résultat ne se généralise pas pour le problème de contraste. Cependant, la simplification au cas *mono-entrée*, pour lequel le système (3.2) est restreint aux plans $q_i = (y_i, z_i)$, $i = 1, 2$ et le contrôle est tel que $u_y = 0$, garde un intérêt propre d'après la proposition suivante.

Proposition 3.2. *Les extrémales du cas mono-entrée pour le problème de contraste sont des extrémales du cas bi-entrée.*

On peut donc réécrire le système du problème de contraste dans le cas mono-entrée, comme un système affine de la forme :

$$\frac{dq}{dt} = F(q) + uG(q), \quad q = (q_1, q_2), \quad (3.3)$$

avec

$$F = \sum_{i=1,2} (-\Gamma_i y_i) \frac{\partial}{\partial y_i} + (\gamma_i (1 - z_i)) \frac{\partial}{\partial z_i},$$

$$G = \sum_{i=1,2} -z_i \frac{\partial}{\partial y_i} + y_i \frac{\partial}{\partial z_i}.$$

Le contrôle u est scalaire et tel que $|u| \leq M$. Chaque état q_i vit dans le disque unité. Les conditions initiales deviennent $q_1(0) = q_2(0) = (0, 1)$ tandis que les conditions terminales s'écrivent $q_1(t_f) = (0, 0)$. Enfin, le coût du problème de contraste, que l'on cherche à minimiser, est $c(q(t_f)) = -|q_2(t_f)|^2 = -(y_2(t_f)^2 + z_2(t_f)^2)$.

Application du PMP et Classification des extrémales

D'après le principe du maximum de Pontryagin (1.1), si le contrôle admissible $u(\cdot)$ – dont la trajectoire associée est notée $x(\cdot)$ – est optimal sur $[0, t_f]$, alors il existe un vecteur adjoint non trivial $p(\cdot)$ tel que pour presque tout $t \in [0, t_f]$,

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

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

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

56 Chapitre 3. Application au problème de contraste en imagerie médicale

avec $H = H_F + uH_G$ le pseudo-Hamiltonien, où $H_F = \langle p, F \rangle$ et $H_G = \langle p, G \rangle$. Les équations du système adjoint sont, pour $i = 1, 2$:

$$\begin{aligned}\dot{p}_{y_i} &= \Gamma_i p_{y_i} - u p_{z_i}, \\ \dot{p}_{z_i} &= \gamma_i p_{z_i} + u p_{y_i}.\end{aligned}$$

La condition de maximisation nous donne deux types d'extrémales :

- **Extrémales régulières.** Soit $z(\cdot) = (q(\cdot), p(\cdot))$ une extrémale régulière sur $[0, t_f]$. Le contrôle alors saturant est donné par $u(t) = M \operatorname{sgn} H_G(z(t))$, pour $t \in [0, t_f]$.
- **Extrémales singulières.** Soit $z(\cdot)$ une extrémale singulière d'ordre 2 sur $[0, t_f]$. D'après la partie §1.1, le contrôle singulier est donné par $u_s = -\frac{\{\{H_G, H_F\}, H_F\}}{\{\{H_G, H_F\}, H_G\}}$, où les relèvements hamiltoniens sont calculés à partir des crochets de Lie suivants :

$$\begin{aligned}[G, F] &= \sum_{i=1,2} (\delta_i z_i - \gamma_i) \frac{\partial}{\partial y_i} + \delta_i y_i \frac{\partial}{\partial z_i} \\ [[G, F], F] &= \sum_{i=1,2} (\gamma_i (\gamma_i - 2\Gamma_i) - \delta_i^2 z_i) \frac{\partial}{\partial y_i} + \delta_i^2 y_i \frac{\partial}{\partial z_i} \\ [[G, F], G] &= \sum_{i=1,2} 2\delta_i y_i \frac{\partial}{\partial y_i} + (\gamma_i - 2\delta_i z_i) \frac{\partial}{\partial z_i},\end{aligned}$$

où $\delta_i = \gamma_i - \Gamma_i$.

Les conditions de transversalité données par le principe du maximum sont les suivantes :

$$\begin{aligned}q_1(t_f) &= 0 \quad (\text{magnétisation nulle du premier spin}) \\ p_2(t_f) &= -2p^0 q_2(t_f), \quad p^0 \leq 0.\end{aligned}\tag{3.4}$$

Si p^0 est non nul, il peut être normalisé à $p^0 = -1/2$. Il est à noter que le contrôle singulier est tel que $u_s(q, \alpha p) = u_s(q, p)$, $\alpha \in \mathbb{R}$, et la normalisation de p^0 fixe la valeur de $|p|$. Le cas $p^0 = 0$ implique qu'il n'y a pas de contrôle du spin 2. De plus, si le temps final est libre, on a la condition $H = 0$ qui implique $H_F = 0$ dans le cas singulier. Un point important est de classer les extrémales au voisinage de la surface de commutation Σ en utilisant les résultats de Réf. [Kup87] repris en §1.1.

Résultats préliminaires

Lemme 3.1. *Dans le problème de contraste mono-entrée, l'extrémale la plus simple est de la forme $\xi_+ \xi_s$.*

Démonstration. L'état initial $((0, 1), (0, 1))$ est un point d'équilibre pour le flot singulier et en raison de la symétrie par rapport à l'axe $y = 0$, on peut prendre $u = +M$ ou

$u = -M$ pour le premier bang. Puisque $\Gamma_i, \gamma_i \ll M$, $i = 1, 2$, un contrôle bang revient qualitativement à une quasi-rotation de chaque spin autour de l'axe z_i , dont la trajectoire associée pour chaque spin converge vers le centre du disque de Bloch, de manière spiraliq. Les trajectoires bang ou bang-bang ne sont donc pas admissibles pour un temps final fixé quelconque. Les candidats les plus simples sont donc de la forme $\xi_+ \xi_s \xi_\pm$. Cependant un arc bang final n'améliore pas le contraste pour une trajectoire dont le spin 2 se trouve à l'extérieur du lieu de colinéarité, défini par $\gamma_2 z_2 (z_2 - 1) + \Gamma_2 y_2^2 = 0$. Ce lieu étant un oval non réduit à un point, dont le pôle nord et le centre font partis. Les solutions possibles les plus simples sont donc de la forme $\xi_+ \xi_s$. \square

Une situation intéressante est le cas limite, lorsque le temps de transfert t_f est égal au temps minimal T_{\min} , nécessaire pour transférer le premier spin en zéro. C'est le problème temps minimal à un seul spin. Les outils pour étudier les problèmes mono-entrée, temps minimal dans le plan, sont développés Réf. [BP04]. Ceux-ci sont repris et étendus pour des systèmes quantiques dissipatifs à deux niveaux d'énergie, dans Réf. [BCS09] de manière générique et dans Réf. [BCG⁺12, Lap11] pour le cas particulier du problème temps minimal à un seul spin partant du point d'équilibre. En outre, la modélisation du problème, l'étude de la contrôlabilité, des lieux conjugués et de coupures, ainsi que la synthèse optimale, sont longuement détaillées Réf. [BS12]. On rappelle maintenant la politique optimale de ce problème pour des paramètres physiques significatifs.

Proposition 3.3. *Supposons que $2\Gamma_1 > 3\gamma_1$, alors la solution temps minimale pour transférer le premier spin du pôle nord au centre de la boule de Bloch est de la forme $\xi_+ \xi_s \xi_+ \xi_s$ et contient deux arcs singulier non vide, le premier étant horizontal dans le plan (y_1, z_1) et le second est un sous-arc de l'axe vertical de révolution Oz_1 .*

Ceci montre que si le temps de transfert est proche de T_{\min} , alors la politique $\xi_+ \xi_s$ n'est plus optimale. Ceci donne de plus pour chaque expérience, une indication sur le lien entre le contraste et les temps de relaxation. Ces résultats sont cruciaux et confirment la place importante des trajectoires singulières dans le contrôle optimal de systèmes non linéaires, Réf. [BC03].

Conditions d'optimalité du deuxième ordre

Cette partie sur les conditions du deuxième ordre, pour un système affine mono-entrée, s'inscrit dans le cadre de la section §1.2.2. On considère ici un problème de type Mayer pour un système $\dot{x} = F(x) + uG(x)$, $x \in X$ ouvert de \mathbb{R}^n , $|u| \leq 2\pi$, $\min_{u(\cdot)} c(x(t_f))$ et on suppose que la variété terminale X_f est une trajectoire du champ de vecteurs $G : \{\exp tG ; t \in \mathbb{R}\}$. Dans ce cas, on obtient une condition suffisante d'optimalité locale, sous réserve de vérifier les hypothèses suivantes, applicable au problème de contraste.

58 Chapitre 3. Application au problème de contraste en imagerie médicale

Hypothèses Soit $z(\cdot) = (x(\cdot), p(\cdot))$ une extrémale singulière sur $[0, t_f]$ solution sur $\Sigma_s \setminus S$ et supposons ce qui suit.

(A1) $t \mapsto x(t)$ est une immersion injective.

(A2) *Condition de régularité forte.*

Pour tout $t \in [0, t_f]$, $\text{Vect}\{\text{ad}^k F_0.F_1(x(t)) \mid k = 0, \dots, n-2\}$ est de codimension un, où $\text{ad} F_0.F_1$ signifie $[F_0, F_1]$.

(A3) *Cas non exceptionnel.* $H_s(z(t))$ est non nul.

On rappelle tout d'abord la proposition suivante de Réf. [BK93].

Proposition 3.4. *Relaxant la contrainte $|u| \leq 2\pi$, une condition nécessaire d'optimalité pour un problème de Mayer, pour un arc singulier ξ_s sur $[0, t_f]$, satisfaisant (A1), (A2) et (A3), est l'absence de temps $0 < t_c < t_f$ conjugué à 0, pour les solutions du système contenues dans un voisinage tubulaire de ξ_s .*

Démonstration. Selon Réf. [BK93], le premier temps conjugué $0 < t_{1c}$ est le premier temps t tel que l'application entrée-sortie $E^{x_0, t} : u(\cdot) \mapsto x(t, x_0, u)$, restreinte aux trajectoires contenues dans un voisinage tubulaire de ξ_s , devienne ouverte. Ceci est clairement une condition nécessaire d'optimalité. \square

Enfin on obtient la condition suivante, suffisante d'optimalité.

Théorème 3.1. *On considère le problème de Mayer avec pour variété terminale $X_f = \{\exp tG ; t \in \mathbb{R}\}$. Soit $\xi_+ \xi_s$ une extrémale sur $[0, t_f]$, satisfaisant les conditions de transversalité (3.4), 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 $t \mapsto \xi_s(t)$ satisfasse les hypothèses (A1), (A2), (A3) et que son contrôle associé $u_s(\cdot)$ sur $[t_1, t_f]$ soit non saturant, i.e. $|u_s| < 2\pi$. Alors l'extrémale $\xi_+ \xi_s$ est optimale sur $[0, t_f]$ dans un voisinage tubulaire de ξ_s fixé, s'il n'existe aucun point conjugué sur $[t_1, t_f]$.*

Démonstration. Selon Réf. [BK93], pour être optimale, il est suffisant de tester une condition de point focal qui consiste à chercher l'existence d'un champ de Jacobi $J = (\delta x, \delta p)$ solution de 1.18 sur $[t_1, t_f]$ tel qu'au temps final t_f , $\delta x \in \mathbb{R}G(\xi_s(t_f))$ (puisque dans le problème de contraste, la variété terminale est donnée par $|q_1(t_f)| = 0$ et $|q_2(t_f)|^2 = m$ et est une courbe intégrale de G) et $J(t)$ semi-vertical pour un temps $t_1 \leq t \leq t_f$. L'assertion suit donc de la condition d'absence de point conjugué. \square

3.2 Le problème à un seul spin en temps minimal

On rappelle une partie de l'étude du problème temps minimal à un seul spin, qui est critique dans l'étude du problème de contraste. On se limite aux cas où les contraintes sur les paramètres, correspondent aux différents cas du tableau 3.1. Basé sur les travaux préliminaires Réf. [LZB⁺10], on analyse les détails de ce problème. Puisque la condition

initiale est sur l'axe z de révolution du système, le système peut être réduit comme nous l'avons vu au plan méridien 2D de la boule de Bloch et le contrôle réduit à un scalaire réel. Le système s'écrit de manière compacte $\dot{q} = F(q) + uG(q)$, avec un contrôle borné par $|u| \leq M$. On a

$$F = -\Gamma y \frac{\partial}{\partial y} + \gamma(1-z) \frac{\partial}{\partial z},$$

$$G = -z \frac{\partial}{\partial y} + y \frac{\partial}{\partial z}.$$

On note $\delta = \gamma - \Gamma$. Les crochets de Lie suivants sont nécessaires pour la suite.

$$[G, F] = (\delta z - \gamma) \frac{\partial}{\partial y} + \delta y \frac{\partial}{\partial z}$$

$$[[G, F], F] = (\gamma(\gamma - 2\Gamma) - \delta^2 z) \frac{\partial}{\partial y} + \delta^2 y \frac{\partial}{\partial z}$$

$$[[G, F], G] = 2\delta y \frac{\partial}{\partial y} + (\gamma - 2\delta z) \frac{\partial}{\partial z},$$

Trajectoires singulières et optimalité. Les trajectoires singulières vérifient $H_G = \dot{H}_G = 0$, $H_G = \langle p, G \rangle$, $p \in \mathbb{R}^2$. Elles se situent donc sur l'ensemble $S : \det(G, [G, F]) = 0$, qui est donné par $y(-2\delta z + \gamma) = 0$. Il y a donc deux arcs singuliers, l'un étant sur l'axe z de révolution, *i.e.* $y = 0$, et l'autre sur la ligne horizontale $z = \gamma/2\delta$. Le contrôle singulier est donné par $D' + u_s D = 0$, où $D := \det(G, [[G, F], G])$ et $D' := \det(G, [[G, F], F])$.

Pour $y = 0$, $D = -z(\gamma - 2\delta z)$ et $D' = 0$. Le contrôle singulier est zéro et une trajectoire singulière est solution de $\dot{y} = -y$, $\dot{z} = \gamma(1-z)$, où le point d'équilibre $(0, 1)$ est stable si $\gamma \neq 0$.

pour $z = \gamma/2\delta$, $D = -2\delta y^2$, $D' = y\gamma(2\Gamma - \gamma)$ et $u_s = \gamma(2\Gamma - \gamma)/2\delta y$, $2\Gamma - y \geq 0$. Le flot le long de la ligne horizontale vérifie

$$\dot{y} = -\Gamma y - \gamma^2 \frac{2\Gamma - \gamma}{4\delta^2 y}$$

et $u_s \rightarrow +\infty$ quand $y \rightarrow 0$.

Un simple calcul donne la proposition suivante.

Proposition 3.5. *Si $\gamma \neq 0$, le contrôle singulier le long de la ligne horizontale est L^1 mais pas L^2 près de $y = 0$.*

Pour étudier l'optimalité des directions singulières, on utilise la condition de Legendre généralisée qui prend la forme suivante pour un système 2D. Soit $D'' := \det(G, F) = \gamma z(z-1) + \Gamma y^2$. L'ensemble $C : D'' = 0$ est le lieu de colinéarité. Si $\gamma \neq 0$, cet ensemble est un ovale non réduit à un point et l'intersection avec la ligne

60 Chapitre 3. Application au problème de contraste en imagerie médicale

horizontale singulière est vide, excepté dans le cas $\gamma = 2\Gamma$. Les arcs singuliers sont temps minimisants (rapides) si $DD'' > 0$ et temps maximisants (lents) si $DD'' < 0$.

Pour compléter l'analyse, on introduit la 1-forme canonique $\alpha = pdq$ qui est définie hors du lieu de colinéarité C par les relations $\langle p, F \rangle = 1$ et $\langle p, G \rangle = 0$, le signe de $d\alpha$ est donné par $y(\gamma - 2\delta z)$. Cette forme différentielle nous permet d'analyser l'optimalité des extrémales singulières et de comparer le temps le long d'extrémales lorsqu'elles ne croisent ni S ou C , Réf. [BC03].

Conditions sur les paramètres. Le cas intéressant est lorsque $z_0 = \gamma/2\delta$ est négatif et de plus $|z_0| < 1$, ce qui amène à la condition $\Gamma > 3\gamma/2$. En utilisant la condition de Legendre généralisée, on voit que la ligne singulière horizontale est rapide si $1 > z > z_0$ et lente si $z_0 > z > -1$. En utilisant la 1-forme, on peut en déduire que près de l'origine, les arcs singuliers brisés formés par un arc horizontal suivi d'un arc vertical sont temps minimal dans le cas non borné $M \rightarrow +\infty$, si les contrôles admissibles sont prolongés dans L^1 . On note aussi qu'une telle trajectoire singulière brisée n'est pas L^2 minimisante (puisque pas dans L^2).

En utilisant tout ceci, on en déduit la synthèse optimale près de l'origine.

La singularité SiSi (interaction entre les deux arcs singuliers). On suppose maintenant que $\Gamma > 3\gamma/2$, et que la borne M est suffisamment grande pour qu'un arc bang partant du pôle nord, intersecter l'arc singulier $z_0 = \gamma/2\delta$. Alors l'arc singulier horizontal est saturant en $y = \gamma(2\Gamma - \gamma)/2\delta M$, et grâce à l'analyse Réf. [LZB⁺10] la politique localement optimal est de la forme $\xi_+ \xi_{s_h} \xi_+ \xi_{s_v}$ et contient donc deux arcs singuliers, le premier horizontal, le second vertical, joints par un deuxième arc bang du même signe que le premier. Il est à noter que l'arc singulier horizontal ne peut être suivi jusqu'au point de saturation. On introduit donc la définition suivante.

Définition 3.1. On appelle *un pont* entre les arcs singuliers, horizontal et vertical, un arc bang tel que la concaténation singulier-bang-singulier est optimale.

Ce concept est important et mène à une généralisation en dimension supérieure qui joue un rôle important dans le problème de contraste. Pour pouvoir compléter l'analyse, pour M suffisamment grand, on doit étudier la politique optimale près du pôle nord.

La singularité SiCo (interaction entre l'arc singulier et l'ensemble colinéaire). Observons tout d'abord que le pôle nord est un équilibre stable pour la dérive et que l'arc vertical est rapide proche du pôle nord si $z < 1$, d'après la condition de Legendre généralisée. De plus, l'ensemble colinéaire forme un oval sous la ligne $z = 1$. En utilisant les coordonnées polaires, $y = r \sin \varphi$, $z = r \cos \varphi$, on obtient $r \frac{dr}{dt} = -D''$, $r \geq 0$. Du coup, r qui représente la pureté du système quantique, diminue en dehors de l'ensemble colinéaire, et augmente à l'intérieur. Le pôle nord est une singularité qui se trouve sur

les ensembles colinéaire et singulier, cependant l'analyse du problème à temps minimal au voisinage de ce point reste simple à cause de la symétrie de révolution. En effet, le seul moyen pour sortir de cette singularité dans le semi-plan gauche du disque de Bloch est de suivre un arc bang $+M$ suivi d'un arc $-M$ pour remplir l'intérieur du domaine et atteindre l'arc singulier vertical.

Nous pouvons maintenant donner la politique optimale globale pour atteindre n'importe quel point du disque de Bloch, à partir du pôle nord.

La synthèse globale. Afin de compléter la synthèse optimale à partir du pôle nord, on joint les deux analyses précédentes, pour combiner les cas SiSi et SiCo. Ceci est représenté Fig. 3.2.

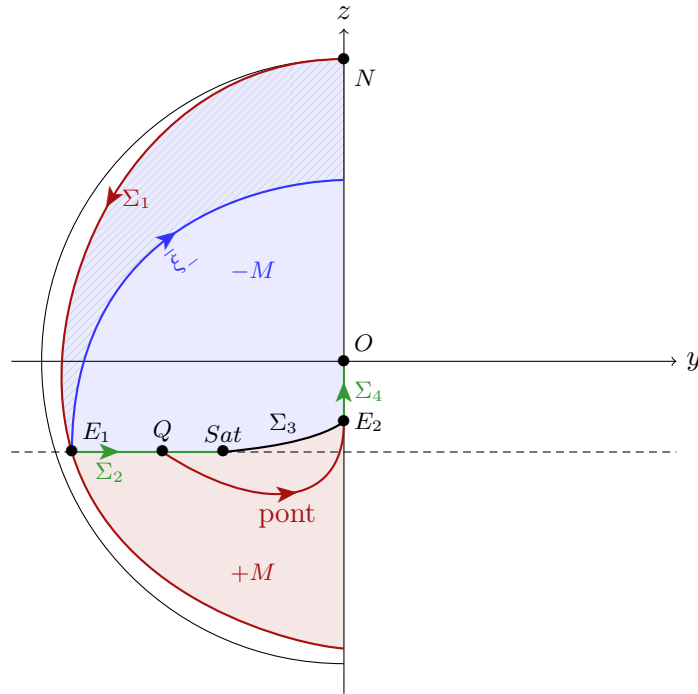


FIGURE 3.2 – Synthèse optimale partant du pôle nord, pour un seul spin : les Σ_i forment le lieu de commutation séparant les régions $+M$ et $-M$ respectivement en rouge et bleue. L'arc bang $\bar{\xi}_-$ sépare les deux domaines, l'un bang-bang (hachuré) et l'autre avec un arc singulier non trivial. La trajectoire optimale pour rejoindre le centre en temps minimal est NE_1QE_2O . Le reste de la synthèse s'obtient par symétrie.

Le lieu de commutation est formé par l'arc partant du pôle nord et atteignant l'arc singulier horizontal en E_1 , noté Σ_1 , par le segment Σ_2 de la ligne singulière horizontale entre E_1 et Sat (où le contrôle est saturant), par le lieu de commutation Σ_3 (venant

62 Chapitre 3. Application au problème de contraste en imagerie médicale

du phénomène de saturation) et par le segment E_2O , noté Σ_4 , entre l'extrémité E_2 du pont, et le centre de la boule O . L'arc bang noté $\bar{\xi}_-$ sépare les deux domaines, l'un avec une politique bang-bang et l'autre avec un arc singulier non trivial. A la limite, lorsque $M \rightarrow +\infty$, cela donne la synthèse construite Réf. [LZB⁺10], où le temps total pour atteindre l'origine est égal au temps le long de l'arc singulier brisé entre E_1 et O . Il est à noter que le lieu de commutation a une structure complexe mais en raison de la symétrie de révolution, tous les points cuts (où l'optimalité globale est perdue) sont localisés sur l'axe z . Cette synthèse est la généralisation de l'analyse des extrémales au voisinage de la surface de commutation (*cf.* §1.1), nécessaire pour comprendre le problème de contraste et le phénomène de pont.

On peut voir en Table 3.2 la valeur des différents points et paramètres significatifs pour certains cas de la Table 3.1.

T_{\min}	z_0	$E_{1,y}$	Q_y	$u(Q)$	Sat_y	$E_{2,z}$	t_{pont}
6.7981	-0.0192	-0.9217	-0.00499	4.6866	-0.00372	-0.00189	0.04009
20.2302	-0.0556	-0.9782	-0.00345	4.7308	-0.00260	-0.05550	0.00989

TABLE 3.2 – Tableau des différents points et paramètres significatifs, pour le sang désoxygéné ($T_1 = 1350$, $T_2 = 50$) sur la première ligne et le liquide cébrospinal ($T_1 = 2000$, $T_2 = 200$) pour la deuxième ligne.

Enfin, on donne Figs. 3.3 et 3.4, la solution temps minimal pour les cas du sang oxygéné et du liquide cébrospinal.

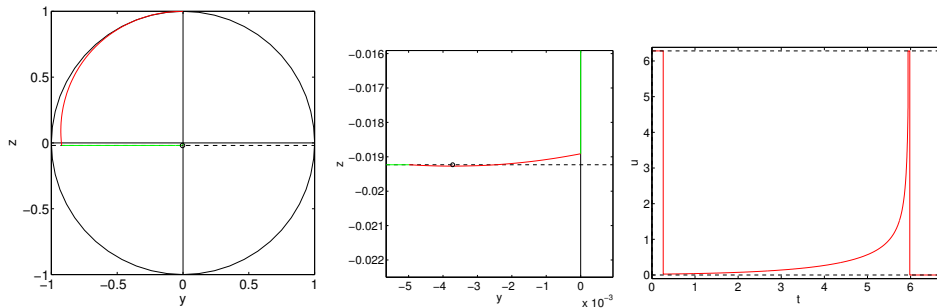


FIGURE 3.3 – Trajectoires dans le plan (y, z) à gauche, pour le sang désoxygéné, avec un zoom au niveau du pont au centre et le contrôle associé à droite. Le cercle noir correspond au point de saturation.

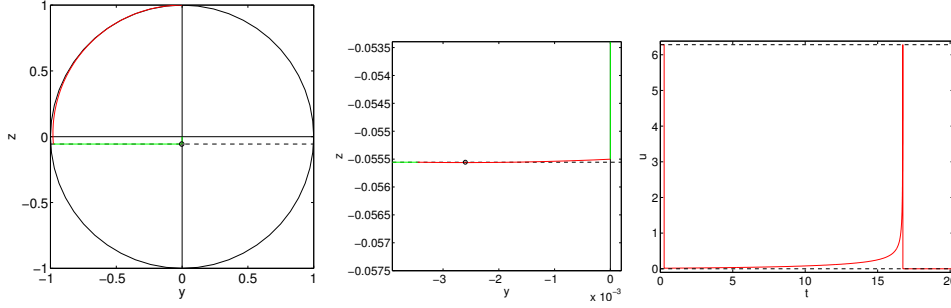


FIGURE 3.4 – Idem que Fig. 3.3 mais pour le liquide cérebrospinal.

3.3 Résultat sur le flot singulier du problème de contraste

Revenons au problème de contraste en deux dimensions et mono-entrée. Le but est donc d'amener le vecteur magnétique du premier spin vers le centre du disque de Bloch tout en maximisant le module du vecteur magnétique du second spin. Ce problème a de possibles applications en résonance magnétique nucléaire dans le but d'augmenter le contraste d'images, *cf.* Réfs. [BHY98, CBD⁺10]. Rapidement dit, les particules avec une magnétisation nulle apparaîtront en noir sur l'image, tandis que celles avec un module maximisé seront plus blanches. Le système dynamique du problème de contraste est donné par les équations (3.3), les conditions de transversalité et le calcul du contrôle optimal qui se retrouve dans la section qui suit ces équations.

Donnons maintenant quelques résultats sur le flot singulier et rappelons tout d'abord le calcul du contrôle singulier. Si le dénominateur ne s'annule pas, le contrôle singulier est donné par

$$u_s = -\frac{\{\{H_G, H_F\}, H_F\}}{\{\{H_G, H_F\}, H_G\}},$$

où les crochets de Poisson ont été calculés auparavant et les extrémales associées sont solutions des équations hamiltoniennes suivantes

$$\dot{z} = \vec{H}_s(z), \quad z(0) \in \Sigma_s \setminus S, \quad (3.5)$$

où $H_s = H_F + u_s H_G$, mais aussi $\Sigma_s := \{z, H_G(z) = \{H_F, H_G\}(z) = 0\}$ et $S := \{z, \{\{H_G, H_F\}, H_G\}(z) = 0\}$. Ces équations définissent un champ de vecteurs hamiltonien sur la surface $\Sigma_s \setminus S$. On note dorénavant $D := \{\{H_G, H_F\}, H_G\}$ et $D' := \{\{H_G, H_F\}, H_F\}$. L'équation différentielle (3.5) peut être désingularisée en utilisant la paramétrisation $ds = dt/D(z(t))$. On obtient alors les équations restreintes à la surface Σ_s suivantes.

$$\frac{dq}{ds} = DF - D'G, \quad \frac{dp}{ds} = -p \left(D \frac{\partial F}{\partial x} - D' \frac{\partial G}{\partial x} \right).$$

64 Chapitre 3. Application au problème de contraste en imagerie médicale

Dans le cas du problème de contraste, puisque l'ensemble d'état du système est de dimension quatre, en utilisant les contraintes $H_G = \{H_G, H_F\} = 0$ et l'homogénéité par rapport à p , les équations (3.5) peuvent être réduites à une équation de la forme suivante.

$$\frac{dq}{dt} = F(q) - \frac{D'(q, \lambda)}{D(q, \lambda)} G(q),$$

où λ est un paramètre scalaire dépendant du temps dont la dynamique est déduite des équations adjointes. Ainsi, pour chaque condition initiale $q_0 \in \mathbb{R}^4$, l'ensemble accessible $A(q_0) = \{q(t, q_0) \mid t \geq 0, q(0) = q_0\}$ définit une surface de dimension deux. Cette surface peut être encore réduite d'après la contrainte d'inégalité donnée par la condition de Legendre généralisée : $\{\{H_G, H_F\}, H_G\} \geq 0$. La structure de cette surface dépend très fortement des paramètres de relaxation (Γ_i, γ_i) , $i = 1, 2$ mais aussi de q_0 .

Si le temps de transfert t_f n'est pas fixé, alors d'après le principe du maximum de Pontryagin, on a la condition supplémentaire $H_F(z) + u(z)H_G(z) = 0$ ce qui se réduit à $H_F(z) = 0$ dans le cas singulier. Avec cette nouvelle contrainte, le vecteur adjoint peut être éliminé et le contrôle singulier dans le cas exceptionnel se retrouve être

$$u_s^e(q) = -\frac{D'(q)}{D(q)},$$

où

$$\begin{aligned} D &= \det(F, G, [G, F], [[G, F], G]), \\ D' &= \det(F, G, [G, F], [[G, F], F]), \end{aligned}$$

avec le champ de vecteurs défini par

$$\frac{dq}{dt} = F(q) - \frac{D'(q)}{D(q)} G(q),$$

qui peut aussi être désingularisé par la paramétrisation $ds = dt/D(z(t))$ et donner le champ de vecteurs lisse

$$\frac{dq}{ds} = DF - D'G.$$

Il est à noter que le pôle nord est un point singulier de cette équation dont la partie linéaire est nulle. Il faut donc analyser la partie quadratique (*cf.* Réf. [Mar60]) pour étudier le comportement du flot singulier au voisinage du pôle nord.

Calcul des conditions suffisantes du deuxième ordre

Cas non exceptionnel Nous reprenons ici le test 2 de la section 1.2.2 dans le cas particulier du problème de contraste. Les conditions suffisantes d'optimalité sont donc liées au concept de point conjugué. Selon la définition 1.11, un temps $t_c \in]t_1, t_f]$, est un

temps conjugué s'il existe un champ de Jacobi $\delta z(\cdot) = (\delta q(\cdot), \delta p(\cdot))$, semi-vertical en t_1 et t_c . Ainsi, un champ de Jacobi le long d'une extrémale singulière, semi-vertical en t_1 , doit vérifier les trois conditions suivantes.

(i)

$$\begin{aligned} dH_G(z(t_1)).\delta z(t_1) &= -\delta z_1.p_{y_1} + \delta y_1.p_{z_1} - \delta z_2.p_{y_2} + \delta y_2.p_{z_2} \\ &\quad - z_1.\delta p_{y_1} + y_1.\delta p_{z_1} - z_2.\delta p_{y_2} + y_2.\delta p_{z_2} \\ &= 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} d\{H_F, H_G\}(z(t_1)).\delta z(t_1) &= -\delta_1.\delta z_1.p_{y_1} - \delta_1.\delta y_1.p_{z_1} - \delta_2.\delta z_2.p_{y_2} - \delta_2.\delta y_2.p_{z_2} \\ &\quad + (\gamma_1 - \delta_1.z_1).\delta p_{y_1} - \delta_1.y_1.\delta p_{z_1} + (\gamma_2 - \delta_2.z_2).\delta p_{y_2} - \delta_2.y_2.\delta p_{z_2} \\ &= 0; \end{aligned}$$

(ii) $\delta q(t_1) \in \text{Vect}\{G(q(t_1))\}$;

(iii) $p(t_1)\delta p(t_1) = 0$ (linéarisation de $|p(t_1)| = 1$ qui rompt l'homogénéité en (p^0, p)), ce qui peut s'écrire $[0_{1 \times n} \quad {}^t p(t_1)].\delta z(t_1) = 0$.

La seconde condition peut-être réécrite ainsi. Puisque $G(q(t_1))$ est non nul, il existe $A \in L(\mathbb{R}^n, \mathbb{R}^{n-1})$ de rang maximal $(n-1)$ tel que $\text{Vect}\{G(q(t_1))\} = \ker A$ ($A \in \mathbb{R}^{(n-1) \times n}$ est formé par les vecteurs d'une base de $\{G(q(t_1))\}^\perp$). Si l'on note $B := [A \quad 0_{(n-1) \times n}] \in L(\mathbb{R}^{2n}, \mathbb{R}^{n-1})$, alors $\delta q(t_1) \in \text{Vect}\{G(q(t_1))\}$ est équivalent à $B.\delta z(0) = 0$.

Finalement, considérons la matrice suivante :

$$C := \begin{pmatrix} 0_{1 \times n} \quad {}^t p(t_1) \\ dH_G(z(t_1)) \\ d\{H_F, H_G\}(z(t_1)) \\ B \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{(n+2) \times 2n},$$

les trois conditions deviennent alors $C.\delta z(0) = 0$. Sous nos hypothèses, C est de rang maximal, C a donc un noyau de dimension $2n - (n+2) = n-2$, qui définit deux champs de Jacobi $\delta z_i(t) = (\delta q_i(t), \delta p_i(t))$, $i = 1, 2$, puisque $n = 4$. On peut prendre par exemple comme base de champs de Jacobi, deux vecteurs du noyau unitaires et non colinéaires.

Un temps $t_c > t_1$ est un temps conjugué, dans le cas non exceptionnel, si la condition de rang suivante est vérifiée.

$$\text{rang}\left(\delta q_1(z(t_c)), \delta q_2(z(t_c)), G(q(t_c))\right) < 3. \quad (3.6)$$

Puisque F est transverse au cône de Pontryagin le long de la trajectoire (hypothèse (A4)), ce test est équivalent à :

$$\det\left(\delta q_1(z(t_c)), \delta q_2(z(t_c)), G(q(t_c)), F(q(t_c))\right) = 0. \quad (3.7)$$

Cas exceptionnel Dans le cas à t_f libre, on a la condition supplémentaire que le Hamiltonien est nul, *i.e.* $H = \langle p, F + u_s^e G \rangle = 0$. Un champ de Jacobi doit donc vérifier, le long d'une extrémale singulière et exceptionnelle, les trois conditions précédentes, plus la condition (iv) : $f(t_1)\delta p(t_1) = 0$, où $f(t_1) = F(q(t_1)) + u_s^e(t_1)G(q(t_1))$. Les contraintes (i)-(iv) définissent alors un seul champ de Jacobi $\delta z(\cdot) = (\delta q(\cdot), \delta p(\cdot))$ unitaire (au signe près) qui forme une base des champs de Jacobi. D'après Réf. [BCT07a], un instant $t_1 < t \leq t_f$ est alors un temps conjugué pour le cas exceptionnel, si :

$$\text{rang} \left(\delta q(z(t_c)), G(q(t_c)), F(q(t_c)) \right) < 3. \quad (3.8)$$

Puisque $\text{ad}^2 G.F$ est transverse au cône de Pontryagin le long de la trajectoire (hypothèse (A3)), ce test est équivalent à :

$$\det \left(\delta q(z(t_c)), G(q(t_c)), F(q(t_c)), [[G, F], G](q(t_c)) \right) = 0. \quad (3.9)$$

L'intégration des équations variationnelles pour le calcul des champs de Jacobi et l'intégration du champ hamiltonien pour le calcul de l'extrémale, sont réalisées par la routine `expdhvfun` du programme `HAMPATH` Réf. [CCG10].

Résultats numériques

Les premiers résultats sur le flot singulier et le calcul d'extrémales Bang-Singulières pour le problème de contraste, sont portés en annexe A. Il est d'abord étudié des extrémales temps minimisantes et temps maximisantes pour le cas exceptionnel puis à temps final fixé. La seconde partie de l'annexe est consacrée à la recherche de solutions Bang-Singulières. On reprend ici les conclusions de cette annexe. Le pôle nord, en plus d'être un point d'équilibre, semble être attractif pour les trajectoires singulières. Le lieu S (où le dénominateur du contrôle singulier s'annule) possède de nombreuses géométries différentes possibles et l'on trouve une quantité non négligeable d'extrémales singulières dont le contrôle part à l'infini. En couplant les méthodes géométriques issues du PMP, à un premier algorithme naïf, il a été possible de trouver des solutions Bang-Singulières respectant les conditions de transversalités. Cependant, cet algorithme ne permet pas facilement d'expliquer les différentes stratégies en fonction des paramètres, que sont les temps de relaxation et le temps final. Il ne permet pas en l'état de trouver des solutions plus complexes de types *BSBS*. Il sera plus facile par la continuation différentielle, de comprendre les déformations dépendant des paramètres. De plus, on pourra par des techniques de régularisation, capturer la structure optimale pour un jeu de données particulier. La section suivante détaille la méthode de régularisation choisie ainsi que les résultats que l'on peut en tirer. Enfin, les sections d'après permettent dans le cas du sang et du fluide, tout d'abord de déterminer la stratégie optimale en fonction du temps,

mais aussi par la suite, de mieux comprendre les difficultés inhérentes au problème de contraste, dues aux nombreuses quasi-symétries qu'il possède.

3.4 Régularisation du problème de contraste

Dans cette section, on présente la méthode numérique d'homotopie différentielle, issue du package HAMPATH, utilisée pour la régularisation. L'étude géométrique du problème nous assure que la solution optimale est une concaténation de séquences Bang-Singulière (*BS*). La stratégie présentée dans la section suivante est de régulariser le problème afin de détecter, par la continuation, la séquence *BS* optimale et d'obtenir une bonne approximation de la solution. Cette approximation obtenue par des méthodes de continuation sera ensuite utilisée dans la section suivante pour initialiser le calcul de la solution optimale par tir multiple. On pourra alors étudier le comportement des solutions en fonction de paramètres, comme le temps de transfert ou bien encore les temps de relaxation. Les conditions d'optimalité du deuxième ordre seront vérifiées afin d'affirmer ou non l'optimalité locales des extrémales trouvées.

Méthode homotopique

Afin de trouver la structure et une bonne approximation des solutions, on définit deux régularisations de type Tychonov Réf. [Moi85] qui seront analysées par les techniques d'homotopie différentielle. La première qui sera notée régularisation $L^{2-\lambda}$ transforme le problème de Mayer en une forme de Bolza avec comme coût :

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

tandis que la seconde appelée régularisation L^2 a pour coût :

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

Si le contrôle est saturant alors sa valeur est donnée par $u(t) = 2\pi \cdot \text{sgn}(H_G)$ dans chacun des cas. Sinon, selon la condition de maximisation, nous avons pour la régularisation $L^{2-\lambda}$:

$$u(q, p, \lambda) = \text{sgn}(H_G) \left(\frac{2|H_G|}{(2 - \lambda)(1 - \lambda)} \right)^{\frac{1}{1-\lambda}},$$

tandis que pour la régularisation L^2 , le contrôle u est égal à

$$u(q, p, \lambda) = \frac{H_G}{(1 - \lambda)},$$

68 Chapitre 3. Application au problème de contraste en imagerie médicale

où $p(\cdot)$ est le vecteur adjoint. En remplaçant u par sa valeur en fonction de q , p et λ dans les deux pseudo-Hamiltoniens décrivant chaque régularisation, nous avons le système Hamiltonien suivant :

$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p}(q, p, \lambda), \quad \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q}(q, p, \lambda),$$

avec

$$\begin{aligned} H(q, p, \lambda) &= p^0(1 - \lambda)|u(q, p, \lambda)|^{2-\lambda} + H_F(q, p) + u(q, p, \lambda) H_G(q, p) \\ &\text{ou} \\ H(q, p, \lambda) &= p^0(1 - \lambda)|u(q, p, \lambda)|^2 + H_F(q, p) + u(q, p, \lambda) H_G(q, p), \end{aligned}$$

qui ne dépend plus de u . La première régularisation se rapproche pour des valeurs de λ proche de 1, à une pénalisation de type L^1 . On peut maintenant introduire la famille à un paramètre d'équations de tir (ou *fonction homotopique*), qui est définie par les conditions de transversalités (3.4) :

$$\begin{aligned} S : \Omega \subset \mathbb{R}^n \times [0, 1) &\rightarrow \mathbb{R}^n \\ \begin{pmatrix} p_0 \\ \lambda \end{pmatrix} &\mapsto S(p_0, \lambda) = \begin{pmatrix} q_1(t_f, q_0, p_0, \lambda) \\ q_2(t_f, q_0, p_0, \lambda) - p_2(t_f, q_0, p_0, \lambda) \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

avec $q_0 = q(0) = N = ((0, 1), (0, 1))$ et $p^0 = -1/2$. Le temps final t_f étant fixé. Pour chaque régularisation, on résout le problème en $\lambda = 0$ par la méthode de tir simple par le biais de la routine `ssolve` de `HAMPATH`, cf. §2.2.2. Ensuite, on calcule le chemin de zéros avec la fonction `hampath` pour $\lambda \in [0, \lambda_f]$ avec $\lambda_f < 1$ aussi proche de 1 que possible, cf. §2.2.3.

Comparaison des deux homotopies

Tous les résultats de cette sous-section sont obtenus dans le cas du sang et pour t_f fixé à $1.1T_{\min}$ où T_{\min} est le temps minimal pour transférer le premier spin du pôle nord en $(0, 0)$, cf. Tables 3.1 et 3.2. Lorsque λ est égal à zéro, les deux régularisations coïncident ; remarquablement, les deux sont initialisées en utilisant une initialisation triviale pour le vecteur adjoint initial inconnu, $p_0 = 5.10^{-2} \times (1, 1, 1, 1)$. La solution en $\lambda = 0$, cf. Fig. 3.5, est obtenue pour une précision de l'ordre de 10^{-14} sur la norme de la fonction de tir. Pour obtenir la solution symétrique, avec un contrôle opposé, les composantes p_{y_1} et p_{y_2} du vecteur adjoint initial doivent être multipliée par -1 .

Le chemin de zéros est ensuite suivi jusqu'à $\lambda_f = 0.925 < 1$ pour la régularisation $L^{2-\lambda}$ et $\lambda_f = 0.993 < 1$ pour la L^2 . Il est donné Table 3.3, les valeurs des deux vecteurs adjoints calculés en λ_f pour les deux régularisations, pour $t_f = 1.1T_{\min}$.

Le chemin de zéros est représenté sur le sous-graphe de gauche Fig. 3.6 pour chacune des régularisations. Les deux chemins semblent converger vers la même valeur, en norme sur le vecteur adjoint initial. L'évolution du contraste ainsi que l'évolution du

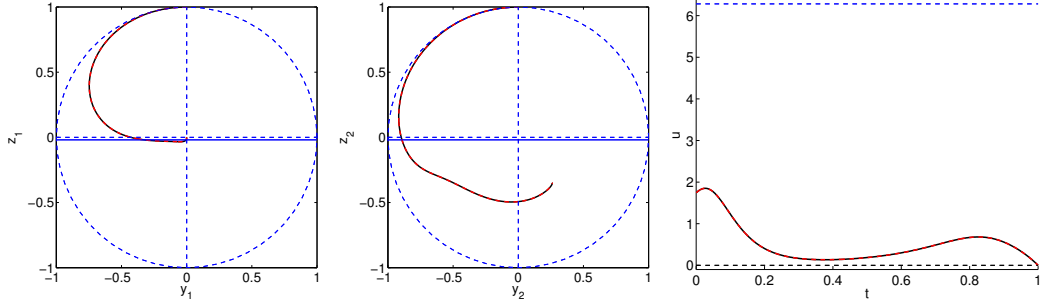


FIGURE 3.5 – **Cas du sang.** Solution pour $\lambda = 0$ ($t_f = 1.1 \times \min t_f$). Trajectoires des spins 1 et 2 dans les plans (y, z) figurent à gauche. Les contrôles correspondant sont illustrés dans le sous-graphe de droite. Dans chaque sous-graphe, la courbe associée à l'homotopie L^2 (resp. $L^{2-\lambda}$) est en tirets rouge (resp. en noir plein).

	$L^{2-\lambda}$	L^2
$p(0)$	$\begin{pmatrix} 0.019673296355 \\ -0.08602129168 \\ -0.065816479816 \\ 0.23691405203 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0.018598628992 \\ -0.08745037815 \\ -0.036233790522 \\ 0.24150596573 \end{pmatrix}$

TABLE 3.3 – **Cas du sang.** Deux solutions régularisées en $t_f = 1.1 \times \min t_f$ pour $\lambda = 0.925$ pour la régularisation $L^{2-\lambda}$ et $\lambda = 0.993$ pour L^2 .

premier point conjugué, le long des deux chemins figurent aussi Fig. 3.6. Du fait des régularisations, le contrôle est suffisamment régulé pour que le calcul des points conjugués soit effectué dans le cadre lisse présenté section §1.2.1. Contrairement au chemin, il n'est pas clair que le contraste et le premier temps conjugué convergent vers la même valeur pour les deux homotopies. On peut remarquer la différence de comportement entre les deux homotopies. La courbe de contraste pour la régularisation L^2 est strictement croissante contrairement à celle provenant de la régularisation $L^{2-\lambda}$. De plus, la courbe de contraste pour L^2 est toujours au dessus de celle pour $L^{2-\lambda}$. Puisque les trajectoires des problèmes régularisés sont admissibles pour le problème de départ, il est donc possible et envisageable d'implémenter les solutions régularisées en pratique et dans ce cas, la régularisation L^2 est donc préférable. Les courbes des premiers temps conjugués en fonction de λ montre que toutes les extrémals régularisées sont optimales localement. En effet, le temps conjugué t_c est normalisé par rapport à t_f et l'on voit qu'aucun temps conjugué n'est inférieur à 1. Cependant, les temps conjugués pour les problèmes régularisés ne semblent pas converger vers le premier temps conjugué trouvé pour la solution en $\lambda = 1$.

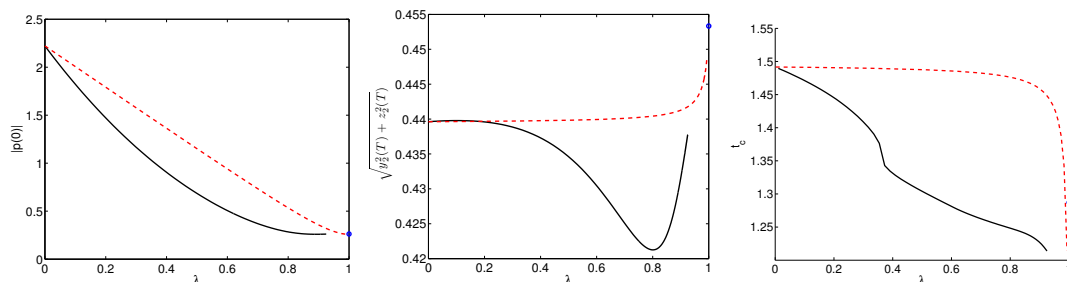


FIGURE 3.6 – **Cas du sang.** Chemins de zéros à gauche, contraste au centre et premier temps conjugué à droite ($t_f = 1.1 \times \min t_f$). Dans chaque sous-graphe, la courbe associée à l’homotopie L^2 (resp. $L^{2-\lambda}$) est en tirets rouge (resp. en noir plein). Le point bleu correspond à la meilleure solution Bang-Singulière pour $\lambda = 1$ trouvée Table 3.4. On remarque que le contraste et le chemin semble converger vers cette solution. Il n’en est pas de même pour le premier temps conjugué.

Nous pouvons voir Fig. 3.7, l’évolution du contrôle le long du chemin de zéros. Il résulte de cette figure que la régularisation $L^{2-\lambda}$ révèle une structure BS lorsque λ tend vers 1. La régularisation L^2 , quant à elle, ne permet pas de conclure sur ce point. C’est pourquoi $L^{2-\lambda}$ semble plus appropriée pour résoudre le problème. Cependant, il est à noter que même si L^2 ne permet pas de détecter clairement la structure BS , elle permettra par la suite d’initialiser la résolution du problème en $\lambda = 1$, cf. §3.5. Ceci s’explique par la bonne convergence sur le chemin de zéros.

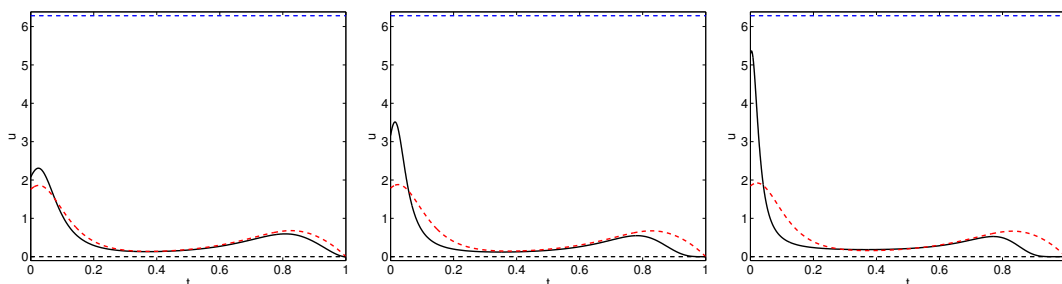


FIGURE 3.7 – **Cas du sang.** Contrôles pour $\lambda = 0.5, 0.8, 0.9$ ($t_f = 1.1 \times \min t_f$). Dans chaque sous-graphe, la courbe associée à l’homotopie L^2 (resp. $L^{2-\lambda}$) est en tirets rouge (resp. en noir plein). Quand $\lambda \rightarrow 1$, la structure BS est révélée par $L^{2-\lambda}$.

Sensibilité des solutions par rapport aux paramètres pour le régularisé

Jusqu’ici, le temps final t_f était fixé. Un problème important est d’étudier le comportement des solutions par rapport au paramètre t_f . Ceci est fait en changeant la

paramétrisation du problème de contraste tel que le nouveau temps \bar{t} soit dans $[0, 1]$. On introduit $t_f \cdot \bar{t} = t$ qui nous amène à considérer t_f comme un paramètre homotopique. Les Hamiltoniens sont multipliés par t_f et nous avons une famille à un paramètre d'équations de tir de la forme $S(p_0, \bar{t}_1, z_1, t_f)$, $\bar{t}_1 = t_1/t_f$, qui sont résolues par les techniques de continuation. Une continuation est donc faite sur le temps final pour les deux régularisations et les deux courbes de contraste le long des deux chemins sont présentes Fig. 3.8. Le paramètre λ est fixé à 0.91 pour $L^{2-\lambda}$ et 0.98 pour L^2 . On remarque que même si la régularisation L^2 ne permet pas de capturer nettement la structure des solutions, elle donne en revanche une meilleure approximation de la fonction valeur. On peut ajouter à cela que la continuation sur le temps final est nettement plus rapide pour la régularisation L^2 . Les valeurs 0.91 et 0.98 sont choisies inférieures aux λ_f afin de fournir des résultats en temps convenables. Sur le sous-graphe de droite a été ajouté la courbe de contraste solution pour le problème en $\lambda = 1$ qui se trouve Fig. 3.13 page 75. On remarque clairement la meilleure approximation de la courbe venant de L^2 .

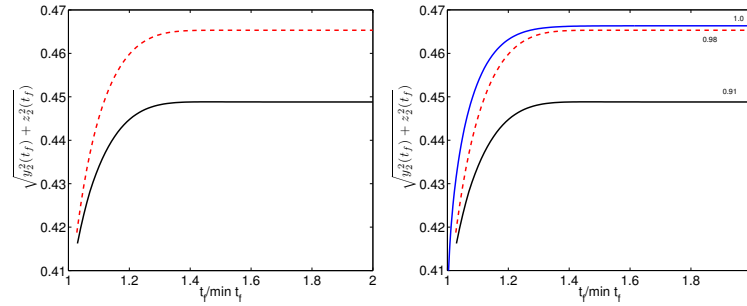


FIGURE 3.8 – **Cas du sang.** Contraste en fonction du temps final normalisé par T_{\min} en noir pour la régularisation $L^{2-\lambda}$ et en tirets rouge pour L^2 . La courbe rouge étant au dessus de la noire, la régularisation L^2 donne une meilleure approximation de la fonction valeur lorsque λ tend vers 1. Le paramètre λ est fixé à 0.91 pour $L^{2-\lambda}$ et 0.98 pour L^2 . Sur le sous-graphe de droite a été rajouté en bleu la courbe de contraste obtenue par la suite, cf. Fig. 3.13 page 75 pour des solutions Bang-Singulières.

En Fig. 3.9, on calcule par interpolation le contraste pour différents temps de relaxation, pour des déformations des cas du sang, du fluide et du cerveau. Pour chacun des trois exemples, le temps de transfert t_f est fixé à $1.5T_{\min}$ car d'après les graphes de la fonction valeur (dépendant de t_f), le contraste pour $1.5T_{\min}$ est maximal à près de 99%. Nous pouvons remarquer sur la figure, à gauche que le contraste au point $O = (1350, 200)$ (cas du sang) est entre 0.4 et 0.5, qu'au centre en $O = (2500, 2500)$ (cas du fluide) le contraste est entre 0.7 et 0.8, et à droite en $O = (780, 90)$ (cas du cerveau), le contraste est médiocre, de l'ordre de 0.1. Ces résultats sont bien évidemment en accord avec ceux Table A.4. Il faut noter que pour le liquide cébrospinal, les temps de relaxation sont ici $T_{11} = 2000$ et $T_{12} = 200$.

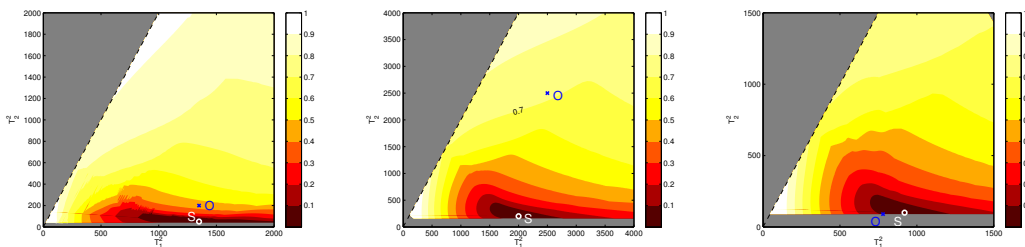


FIGURE 3.9 – Contraste obtenu par interpolation pour différents temps de relaxation, pour des déformations des cas du sang (à gauche), du fluide (au centre) et du cerveau (à droite). Les graphes dépendent des paramètres du deuxième spin. Ceux du premier sont fixés à $(T_{11}, T_{12}) = (1350, 50)$, $(2000, 200)$ et $(920, 100)$ de gauche à droite. Les points O donnent le contraste pour les problèmes connus du sang, du fluide et du cerveau. Nous considérons les variations suivantes pour le second spin : $x_{\min} \leq T_{21} \leq x_{\max}$ et $y_{\min} \leq T_{22} \leq y_{\max}$, où $(x_{\min}, x_{\max}, y_{\min}, y_{\max}) = (80, 4000, 160, 4000)$, $(45, 1500, 90, 1500)$ et $(20, 2000, 40, 2000)$ de gauche à droite. La contrainte $T_2 \leq 2T_1$ restreint les paramètres à appartenir à un polyèdre convexe, noté P . Le point initial des futures continuations est $S = (T_{11}, T_{12})$ pour lequel le contraste est nul. Ensuite, nous discrétisons les arêtes du polytope P en n points et pour chaque $F_k = (T_{21}^k, T_{22}^k)$, $k = 1, \dots, n$, on réalise une homotopie linéaire de S vers F_k en introduisant un paramètre homotopique $\alpha \in [0, 1]$ tel que : $T_{21} = T_{11} + \alpha(T_{21}^k - T_{11})$ et $T_{22} = T_{12} + \alpha(T_{22}^k - T_{12})$. Nous avons alors n segments partant de S qui forment un maillage de P . Pour obtenir le contraste sur la surface entière on utilise une fonction standard d'interpolation de *Matlab*.

3.5 Étude du cas : sang désoxygéné/oxygéné

Pour la suite des simulations numériques, pour cette section et les suivantes, nous gardons la régularisation $L^{2-\lambda}$ qui est plus appropriée puisqu'elle permet de mieux capturer la structure optimale des solutions. En effet, la comparaison précédente entre les deux régularisations donne les mêmes conclusions dans le cas du fluide, étudié à la section suivante. Toutefois, la régularisation L^2 permet tout aussi bien d'initialiser la résolution du problème par tir multiple en $\lambda = 1$. Il est simplement moins évident de reconnaître la structure optimale.

Tir multiple dans le cas Bang-Singulier

Nous avons donc conclu précédemment que la solution optimale dans le cas du sang désoxygéné/oxygéné possède une structure Bang-Singulière. Nous considérons donc ici que la solution du problème de contraste (*i.e.* en $\lambda = 1$) est fait d'une seule séquence BS et notons t_1 , $0 < t_1 < t_f$, l'instant de commutation entre l'arc régulier et l'arc

singulier. Par construction, $z(t)$, $t \in [0, t_f]$ est une concaténation de la courbe intégrale de \vec{H} joignant $z(0)$ et $z_1 = z(t_1)$, où $u(t) = 2\pi \operatorname{sgn} H_G(z(t))$ et de l'extrémale solution de \vec{H}_s partant de z_1 , où z_1 doit vérifier :

$$H_G(z_1) = \{H_G, H_F\}(z_1) = 0. \quad (3.10)$$

Notons $\tilde{z}(\cdot, z_1, t_1)$, $\tilde{z} = (\tilde{q}, \tilde{p})$ l'extrémale singulière partant $z(t_1) = z_1$. Nous pouvons définir la fonction qui associe (p_0, t_1, z_1) aux conditions de transversalité, aux conditions (3.10) et aux conditions de raccordement $z(t_1, x_0, p_0) = z_1$. Cette fonction possède cependant une condition de plus qu'il n'y a de variables. Heureusement, nous pouvons identifier et se débarrasser d'une équation redondante. En effet, le fait que $H_G(\tilde{z}(t_f, z_1, t_1)) = 0$ (puisque l'on est sur la singulière) implique que $\tilde{p}_2(t_f) = \alpha \tilde{q}_2(t_f)$, $\alpha \in \mathbb{R}$, puisque $\tilde{q}_1(t_f) = 0$. Pour satisfaire la condition de transversalité $\tilde{p}_2(t_f) = \tilde{q}_2(t_f)$ (*i.e.* $\alpha = 1$) il est donc nécessaire de vérifier seulement que $\langle \tilde{q}_2(t_f) | \tilde{p}_2(t_f) \rangle = |\tilde{q}_2(t_f)|^2$. On a donc réduit le nombre de conditions et maintenant le problème est bien posé et nous pouvons définir la fonction de tir multiple :

$$S : \mathbb{R}^{3n+1} \rightarrow \mathbb{R}^{3n+1}$$

$$\begin{pmatrix} p_0 \\ t_1 \\ z_1 \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} H_G(z_1) \\ \dot{H}_G(z_1) \\ z(t_1, x_0, p_0) - z_1 \\ \tilde{q}_1(t_f, z_1, t_1) \\ \langle \tilde{q}_2(t_f) | \tilde{p}_2(t_f) \rangle - |\tilde{q}_2(t_f)|^2 \end{pmatrix},$$

qui est de la forme $S(p_0, t_1, z_1) = E(t_1, z_1, z(t_1, q_0, p_0), \tilde{z}(t_f, z_1, t_1))$. On utilise ici aussi la routine `ssolve` pour la résolution par tir multiple, *cf.* §2.2.2. Une représentation schématique de la méthode est détaillée Fig. 3.10.

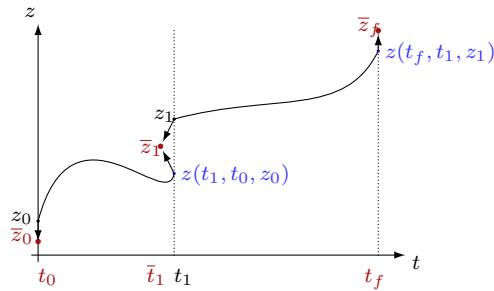


FIGURE 3.10 – Représentation de la méthode de tir multiple pour le cas Bang-Singulier, avec t_f fixé. Les instants t_0 et t_f sont connus. Les points z_0 , z_1 et t_1 sont les choix initiaux. Les points \bar{z}_0 , \bar{z}_1 , \bar{z}_f et \bar{t}_1 sont les solutions. Enfin $z(t_1, t_0, z_0)$ et $z(t_f, t_1, z_1)$ sont obtenus par intégration numérique.

Résolution du problème de contraste

La solution obtenue en $\lambda_f < 1$ pour chaque homotopie est un candidat pour initialiser la méthode de tir multiple. Si l'on suppose une structure BS , alors on cherche $x = (p_0, t_1, z_1)$ tel que $S(x) = 0$. Le vecteur p_0 d'initialisation est la solution en $\lambda_f = 0.925$ pour la régularisation $L^{2-\lambda}$, cf. Table 3.3. Nous avons besoin d'initialiser l'instant de commutation inconnu t_1 entre l'arc bang et singulier. Toute une plage de valeurs est utilisée comme initialisation, comme le montre la Fig. 3.11. Cette ensemble d'initialisations permet d'obtenir trois différentes solutions présentées Table 3.4, indépendamment du choix de la régularisation pour initialiser p_0 . La meilleure des trois solutions peut être observées Fig. 3.12. Le vecteur z_1 étant calculé par intégration numérique, par `exphvfun`, depuis $z_0 = (q_0, p_0)$ en $t_0 = 0$ avec la dynamique donnée pour $\lambda = \lambda_f$. Il aurait été possible de choisir la dynamique en $\lambda = 1$ et donc d'appliquer le premier arc bang pour arriver en z_1 .

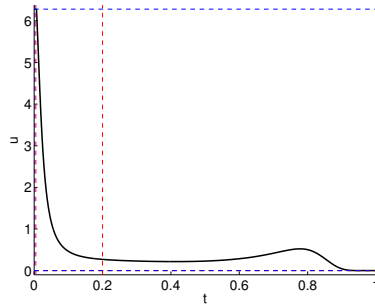


FIGURE 3.11 – **Cas du sang.** Discrétisation de l'intervalle de temps pour définir les inconnues initiales pour t_1 ($t_f = 1.1 \times \min t_f$). Les initialisations choisies sont pour $t_1 \in [0.005, 0.2]$, le temps étant normalisé. Ce choix est heuristique et basé sur la structure du contrôle en λ_f (ici, le contrôle obtenu par la régularisation $L^{2-\lambda}$ est présenté).

No.	1	2	3
t_1/t_f	0.021160642	0.109896521	0.162956530
$p(0)$	$\begin{pmatrix} 0.0311820930 \\ -0.0701235374 \\ -0.0330351532 \\ 0.2485262087 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -0.0278179262 \\ -0.0751559223 \\ 0.0253620957 \\ 0.2226343503 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0.0251573298 \\ -0.0949296970 \\ -0.0296660876 \\ 0.2128080029 \end{pmatrix}$

TABLE 3.4 – **Cas du sang.** Tableau regroupant les trois solutions Bang-Singulière trouvées pour $t_f = 1.1 \times \min t_f$ et pour une erreur sur la norme de la fonction de tir de l'ordre de 10^{-14} . La solution no. 1 étant celle marquée Fig. 3.6.

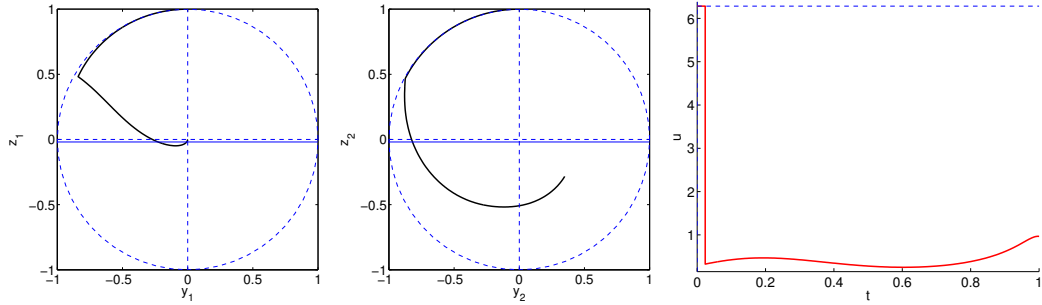


FIGURE 3.12 – **Cas du sang.** Meilleure solution Bang-Singulière (no. 1) obtenue avec un contraste de 0.449 pour $t_f = 1.1 \times \min t_f$. Trajectoires des spins 1 et 2 dans les plans (y, z) à gauche. Le contrôle BS correspondant est illustré dans le sous-graphe de droite.

Influence du temps final

On s'intéresse ici aux comportements des trois solutions trouvées en fonction de t_f . Une homotopie pour $t_f \in [1 + \varepsilon, 2] \times T_{\min}$, $\varepsilon > 0$ petit, est réalisée depuis la solution en $t_f = 1.1T_{\min}$. Le chemin et la fonction valeur le long de celui-ci sont tracés Fig. 3.13.

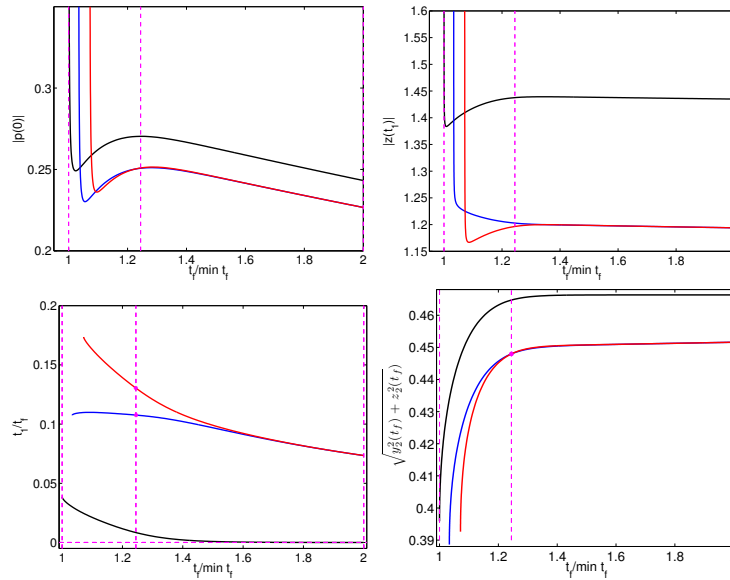


FIGURE 3.13 – **Cas du sang.** Chemin de zéros pour la continuation sur le temps final avec le contraste associé. Sur chaque sous-graphe, les branches associées à la solution no. 1 (courbe noire), 2 (courbe bleue) et 3 (courbe rouge) sont tracées. En abscisse se trouve le temps final t_f normalisé par le temps minimal $\min t_f$. En ordonnée, on retrouve $|p(0)|$, $|z(t_1)|$, t_1/t_f et le contraste. L'axe $t_f = 1.244T_{\min}$ est en magenta.

On détaille les quatre points clés qui ressortent de cette figure :

i) D'après les quatre sous-graphes, les courbes des solutions 2 et 3 convergent vers les mêmes valeurs lorsque t_f devient grand. Cependant, le chemin étant représenté en norme sur $p(0)$ et $z(t_1)$, il n'est pas assuré que les solutions 2 et 3 convergent vers la même solution. Nous pouvons voir Fig. 3.14 les deux différentes stratégies pour les solutions 2 et 3, lorsque $t_f = 2T_{\min}$. La solution est identique à une symétrie près.

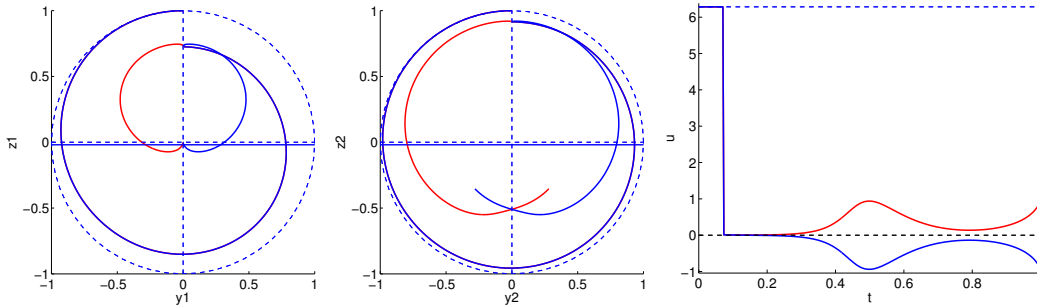


FIGURE 3.14 – **Cas du sang.** Solutions no. 2 et 3 ($t_f = 2 \times \min t_f$). Trajectoires des spins 1 et 2 dans les plans (y, z) à gauche, pour les solutions no. 2 (courbe bleue) et 3 (courbe rouge). Le contrôle BS correspondant est illustré dans le sous-graphe de droite. Les durées des arcs bang sont égales et les contrôles singuliers sont opposés. Les trajectoires singulières sont symétriques par rapport à l'axe z .

ii) D'après le dernier sous-graphe de Fig. 3.13, la courbe de contraste des solutions 2 et 3 se croisent aux alentours de $t_f = 1.244T_{\min}$ avant de converger vers la même valeur. En ce point, nous n'avons pas une bifurcation puisque les durées de l'arc bang sont différentes pour les deux solutions. Les différentes stratégies sont présentées Fig. 3.15. Encore une fois, on remarque l'effet des quasi-symétries sur les trajectoires et le contrôle.

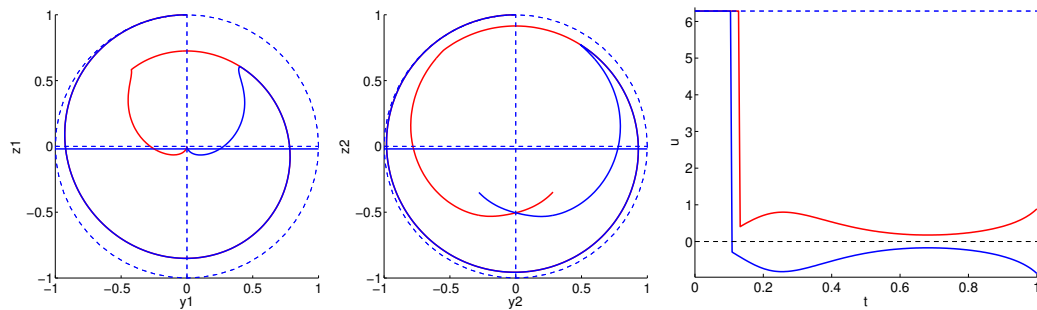


FIGURE 3.15 – **Cas du sang.** Idem que Fig. 3.14 pour $t_f = 1.244 \times \min t_f$. Malgré le faible écart entre les durées des arcs bang, la différence de stratégie est claire et dûe au quasi-symétries du système.

iii) D'après le dernier sous-graphe, la fonction valeur est croissante en fonction du temps final, avec une asymptote horizontale telle qu'aux alentours de $1.3T_{\min}$, le contraste atteint soit égal à 99.5% de la valeur maximale. Puisque le point initial est un point stationnaire, il est logique que la fonction valeur soit croissante dans ce cas. En effet, appliquer un contrôle nul en $t = 0$ laisse le système dans sa position initiale et il y a donc une inclusion des contrôles admissibles lorsque le temps final augmente. De plus d'après le troisième sous-graphe, l'arc bang tend à disparaître pour de grandes valeurs de t_f . L'arc singulier plus long reste proche de 0 plus longtemps, cf. Fig. 3.16.

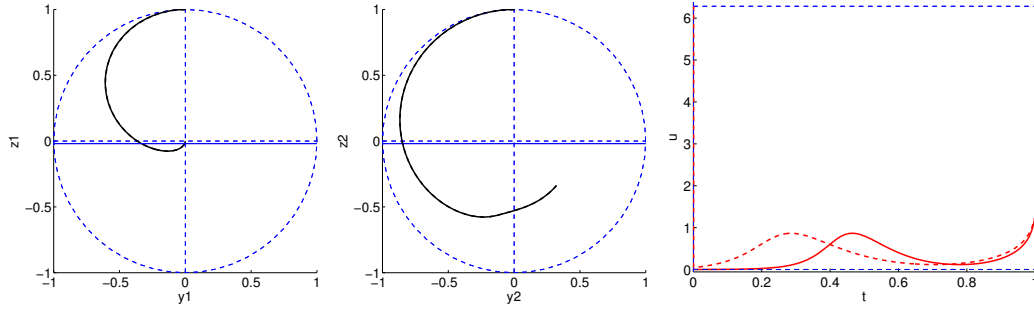


FIGURE 3.16 – **Cas du sang.** Solution no. 3 : $t_f = 1.5 \times \min t_f$ (courbe discontinue) et $t_f = 2 \times \min t_f$ (courbe pleine). Idem que Fig. 3.14 pour la signification des sous-graphes. Les trajectoires sont superposées mais pas les contrôles. L'arc bang tend à disparaître et le contrôle singulier fait en sorte que le spin reste proche du pôle nord plus longtemps.

iv) Tandis que les branches no. 2 et 3 générées par les solutions en $t_f = 1.1 \times \min t_f$ donne des maxima locaux et non globaux, il n'est pas possible d'affirmer que la branche no. 1 correspond à des maximiseurs globaux ; même la branche 1 ne fournit qu'une borne inférieure de la fonction valeur. Nous pouvons finalement remarquer que les solutions ici obtenues sont en accord avec celles présentées Fig. A.13 et Table A.4.

Il est aussi possible de comprendre comment les solutions tendent vers une structure *BSBS* lorsque $t_f \rightarrow \min t_f$. En effet, le graphe Fig. 3.17 nous révèle que la branche no. 1 converge brusquement vers une structure *BSBS* pour t_f proche de T_{\min} . La figure représente la distance minimale du contrôle singulier à la saturation (*i.e.* 2π). Lorsque cette distance vaut 0 alors le contrôle singulier est saturant et provoque l'apparition d'un nouvel arc bang. Pour les solutions no. 2 et 3, la distance est 0 pour t_f supérieur à T_{\min} . D'un autre côté, pour la branche no. 3, la distance tend vers 0 lorsque t_f tend vers T_{\min} et la séquence *BSBS* du problème temps minimal à un seul spin est révélée, cf. Fig. 3.18. Les conditions suffisantes du second ordre sont vérifiées pour la branche no. 1 Fig. 3.19.

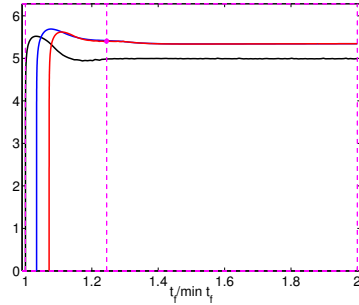


FIGURE 3.17 – **Cas du sang.** La distance minimale du contrôle singulier à la saturation (*i.e.* 2π) pour les branches associées aux solutions no. 1 (noir), 2 (bleu) et 3 (rouge).

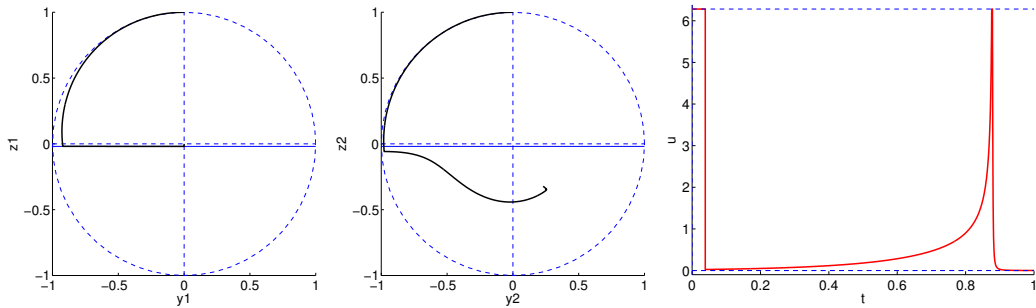


FIGURE 3.18 – **Cas du sang.** Solution no. 3 ($t_f = 1.000004 \times \min t_f$). Idem que Fig. 3.14 pour la signification des sous-graphes. Quand $t_f \rightarrow \min t_f$, la structure *BSBS* apparaît et l'arc singulier sature presque la contrainte $|u| \leq 2\pi$.

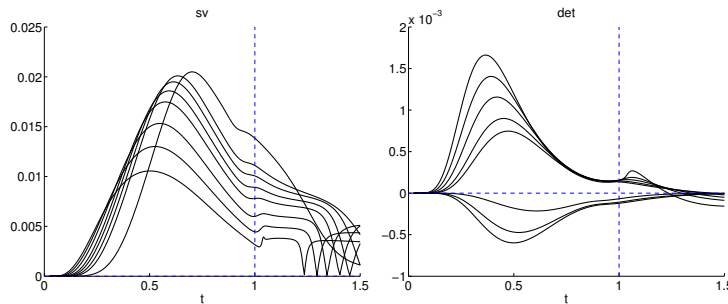


FIGURE 3.19 – **Cas du sang.** Sur la sous-figure de gauche, on retrouve la plus petite valeur singulière en fonction du temps pour différentes valeurs de t_f pour la branche no. 1. Sur la sous-figure de droite est tracée la même chose pour le déterminant. Ce sont les valeurs utilisées dans le calcul des temps conjugués (*cf.* Eqs. (3.8) et (3.9)) résultant du théorème 3.1. Les courbes sont paramétrées afin que le temps final soit toujours égal à 1. On observe que l'ensemble des chutes de rang ont lieu après le temps 1 et donc toutes les trajectoires trouvées sont optimales localement en vertu du théorème.

3.6 Étude du cas : liquide cérébrospinal/eau

Nous étudions ici le cas du liquide cérébrospinal/eau, *cf.* Table 3.1. Nous considérons seulement la régularisation $L^{2-\lambda}$. Le temps final est fixé à $1.5T_{\min}$ où T_{\min} est donné Table 3.2. Pour résoudre le problème en $\lambda = 0$, on utilise l'initialisation triviale $p_0 = 5.10^{-2} \times (1, 1, 1)$. Il est à noter qu'une continuation en $\lambda = 0$, de la solution du problème du sang vers le problème du fluide, nous donne la même solution. Le chemin de zéros, *cf.* Fig. 3.20, est suivi de $\lambda = 0$ à $\lambda_f = 0.954$. On peut voir sur cette figure, l'évolution du contraste le long du chemin et l'évolution du premier temps conjugué. La solution en λ_f est donnée Fig. 3.21. Le graphe du contrôle pour $t_f = 1.5T_{\min}$ nous indique une structure *BSBS* avec un premier contrôle bang négatif et un deuxième positif. La durée et l'instant des deux bangs sont données de manière approximative sur le sous-graphe de droite. Ce calcul est automatisé. On recherche les extremums locaux ainsi que dans un voisinage de ces extremums, les instants où la dérivée seconde change de signe. Le vecteur initial p_0 obtenu en λ_f est un candidat en tant que point initial pour la résolution du problème de contraste par tir multiple. Faisant l'hypothèse que la structure est du type *BSBS*, on doit également initialiser les instants de jonction t_1 , t_2 et t_3 entre les arcs bangs et singuliers. On considère alors une série d'initialisations. Les instants t_i , $i = 1, 3$ sont choisis dans un voisinage des approximations présentées Fig. 3.21. Ceci nous permet d'initialiser le problème de contraste et la solution obtenue est donnée Fig. 3.22 et Table 3.5. C'est cette solution qui est marquée Fig. 3.20.

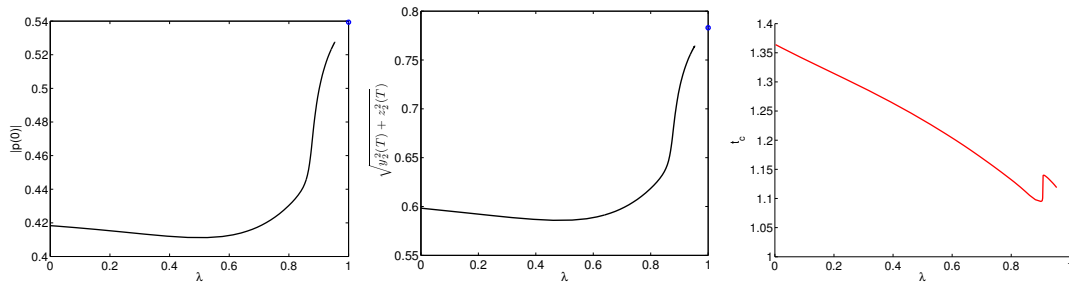


FIGURE 3.20 – **Cas du fluide.** Chemins de zéros à gauche, contraste au centre et premier temps conjugué à droite ($t_f = 1.5 \times \min t_f$). Le point bleu correspond à la solution *BSBS* trouvée pour $\lambda = 1$ détaillée Table 3.5. On remarque que le contraste et le chemin semble converger vers cette solution. La solution étant *BSBS*, le calcul de point conjugué n'a pas été effectué.

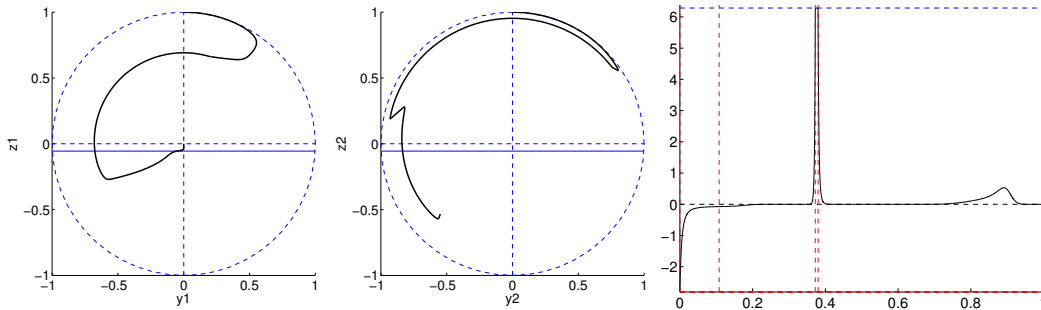


FIGURE 3.21 – **Cas du fluide.** Solution pour $\lambda = 0.954$ ($t_f = 1.5 \times \min t_f$). Le contraste est de 0.765. Trajectoires des spins 1 et 2 dans les plans (y, z) figurent à gauche. Le contrôle correspondant est illustré dans le sous-graphe de droite, avec les durées estimées des arcs.

No.	t_i/t_f	$p(0)$	Contraste
1	$\begin{pmatrix} 0.00336868818 \\ 0.41535968076 \\ 0.43029775693 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -0.03874198092 \\ -0.01603977256 \\ 0.03909407839 \\ 0.53630705168 \end{pmatrix}$	0.783

TABLE 3.5 – **Cas du fluide.** Solution ξ_-, ξ_s, ξ_+ trouvée pour $t_f = 1.5 \times \min t_f$ et pour une erreur sur la norme de la fonction de tir de l'ordre de 10^{-14} .

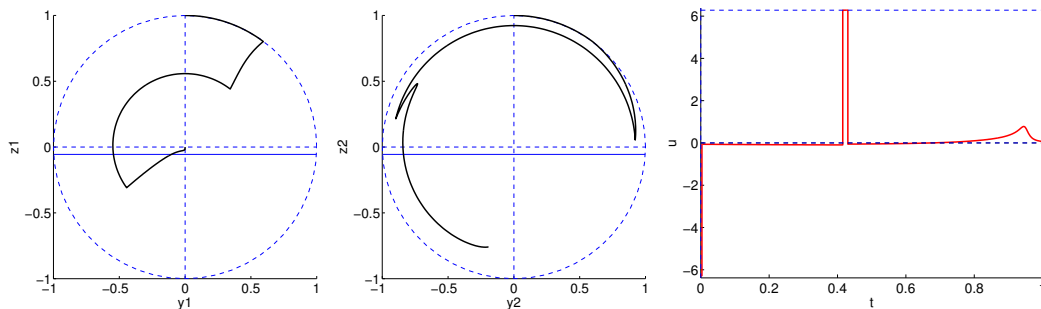


FIGURE 3.22 – **Cas du fluide.** Solution no. 1 pour $\lambda = 1.0$ ($t_f = 1.5 \times \min t_f$). Le contraste est de 0.783. Trajectoires des spins 1 et 2 et contrôle.

Une continuation sur le temps final est ensuite réalisée. Nous remarquons alors un changement de structure durant la continuation. Pour certaines valeurs de t_f , une structure $BSBSBS$ ($3BS$) est observée. La structure est $3BS$ pour $t_f \in [1, 1.225]T_{\min}$ et $2BS$ pour $t_f \in [1.225, 3]T_{\min}$. Notons que lors de la continuation, le changement de structure est automatiquement détecté et ainsi l'homotopie se poursuit sans interruption. Ceci n'est pas intégré à la routine `hampath` mais facilement réalisable en utilisant les options proposées. En effet, lorsque le pas d'intégration, lors du suivi du chemin de zéro, devient trop petit et qu'une singulière devient saturante, un arc bang est ajouté. De même, lorsque la durée d'un bang devient trop petite, l'arc est enlevé. Une résolution par tir multiple est effectuée avec la nouvelle structure et l'homotopie est relancée. Le contraste ainsi que la norme de $p(0)$ le long du chemin sont donnés Fig. 3.23. Au changement de structure, il n'y a pas de discontinuité visible sur les deux graphes. Il est à noter cependant que cette homotopie peut être qualifiée d'étendue, puisque au changement de structure, l'ensemble de définition de la fonction homotopique est modifié.

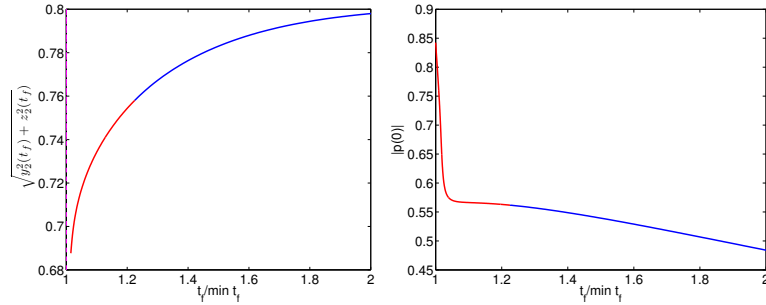


FIGURE 3.23 – **Cas du fluide.** Contraste en fonction du temps final normalisé et norme du vecteur $p(0)$ le long du chemin. La courbe bleue représente la solution $2BS$ et la rouge, la $3BS$.

Sur la Fig. 3.24 on retrouve les instants de jonction le long du chemin et la distance minimale du contrôle singulier à la saturation (*i.e.* 2π) pour la partie $2BS$. On remarque comme dans le cas du sang que la saturation se produit brusquement, ici vers $t_f = 1.225T_{\min}$, pour le dernier arc singulier. Cela se traduit sur le graphe du centre par l'existence pour $t_f < 1.225T_{\min}$ de deux instants de commutation supplémentaires. Finalement, sur le sous-graphe de droite, on remarque que le premier arc singulier disparaît pour $t_f < 1.015T_{\min}$ laissant place à une structure $\xi_{-}\xi_s\xi_{+}\xi_s\xi_{+}\xi_s$, où les deux premiers arcs bang sont respectivement négatif et positif, le dernier arc bang est positif.

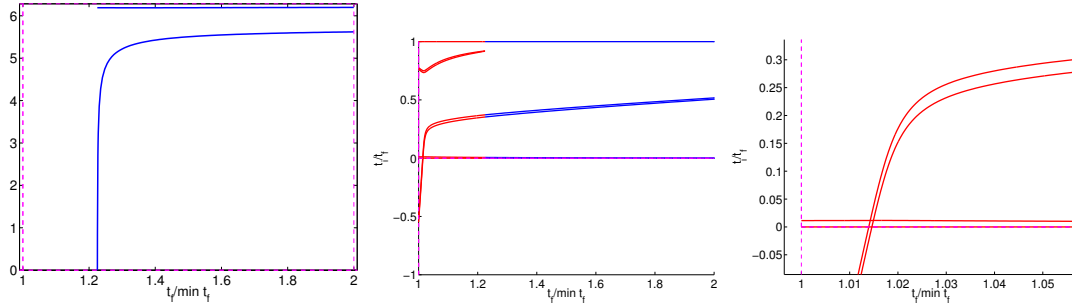


FIGURE 3.24 – **Cas du fluide.** La distance minimale du contrôle singulier à la saturation (*i.e.* 2π) est tracée sur le sous-graphe de gauche. On retrouve au centre, la durée des instants de commutation normalisé par t_f , en fonction du temps final, lui-même normalisé par $\min t_f$. Un zoom pour de petites valeurs de t_f est donné à droite.

Existence d'autres solutions

Pour $\lambda = 0$ et $t_f = 1.5 \times \min t_f$, nous pouvons grâce au tir simple, obtenir d'autres solutions locales, en initialisant la méthode par un autre vecteur adjoint initial. Une continuation sur λ vers 1 nous permet d'initialiser la méthode de tir multiple. Nous dénombrons alors trois solutions supplémentaires intéressantes en $\lambda = 1$, *cf.* Table 3.6.

No.	t_i/t_f	$p(0)$	Contraste
2	$\begin{pmatrix} 0.00337686886 \\ 0.41821822443 \\ 0.43629867438 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0.03777026187 \\ -0.01634784051 \\ -0.03811530482 \\ 0.53362041664 \end{pmatrix}$	0.779
3	$\begin{pmatrix} 0.00354444857 \\ 0.40119004368 \\ 0.48528801370 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0.03078739623 \\ -0.02034430619 \\ -0.03109576206 \\ 0.51959611905 \end{pmatrix}$	0.758
4	$\begin{pmatrix} 0.10258964417 \\ 0.47711141691 \\ 0.49200414524 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -0.02906662879 \\ -0.02334849741 \\ 0.02941374351 \\ 0.51806645975 \end{pmatrix}$	0.756

TABLE 3.6 – **Cas du fluide.** Trois autres solutions *2BS* trouvée pour $t_f = 1.5 \times \min t_f$ et pour une erreur sur la norme de la fonction de tir de l'ordre de 10^{-13} .

La stratégie no. 2 est celle présentée Réf. [Lap11]. Cette solution est du type $\xi_+ \xi_s \xi_+ \xi_s$ contrairement à la no. 1 qui est $\xi_- \xi_s \xi_+ \xi_s$. Elle possède un contraste de 0.779 donc

légèrement inférieur à 0.783 obtenu précédemment. On peut voir Fig. 3.25, la trajectoire et le contrôle de cette solution. Les deux autres sont encore moins bonnes en terme de contraste.

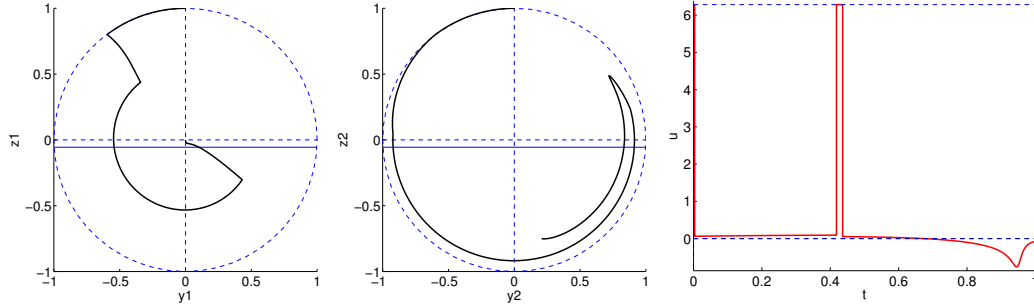


FIGURE 3.25 – **Cas du fluide.** Solution no. 2 pour $\lambda = 1.0$ ($t_f = 1.5 \times \min t_f$). Le contraste est de 0.779. Trajectoires des spins 1 et 2 et contrôle.

Il est alors possible d'étudier le comportement de ces quatre solutions vis-à-vis du temps final. La première remarque est que les deux moins bonnes solutions gardent un contraste inférieur à celui des deux autres, quelle que soit la valeur de t_f . La Fig. 3.26 regroupe la fonction valeur des solutions no. 1 et 2. On remarque que les courbes se croisent en $t_f = 1.035T_{\min}$. On peut voir un zoom au voisinage de ce point sur le sous-graphe de droite et les stratégies résultantes pour les deux solutions Fig. 3.27. D'après les deux sous-graphes, sur la branche no. 2, la stratégie est *3BS* pour $t_f \in [1.008, 1.203]T_{\min}$ et *2BS* ailleurs. On retrouve bien le fait que la stratégie optimale en T_{\min} est *2BS*.

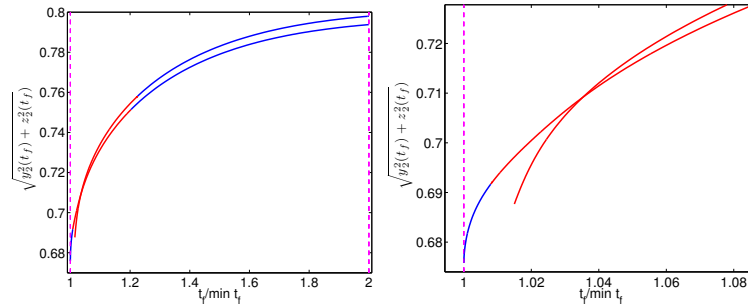


FIGURE 3.26 – **Cas du fluide.** Contraste en fonction du temps final normalisé pour les solutions no. 1 et 2, cf. Tables 3.5 et 3.6. Les courbes bleues représentent des solutions *2BS* et les rouges, des *3BS*. La branche no. 1 est au dessus de la branche no. 2 pour des grandes valeurs de t_f , et au dessous pour de petites valeurs. Les deux branches s'intersectent en $t_f = 1.035T_{\min}$. La meilleur solution est *2BS* puis *3BS*, pour $t_f \in [1.008, 1.203]T_{\min}$ puis de nouveau *2BS*, alternant une stratégie avec les deux premiers arcs de même signe pour $t_f < 1.035T_{\min}$ et une stratégie avec les deux premiers arcs de signe opposé pour de plus grands t_f .

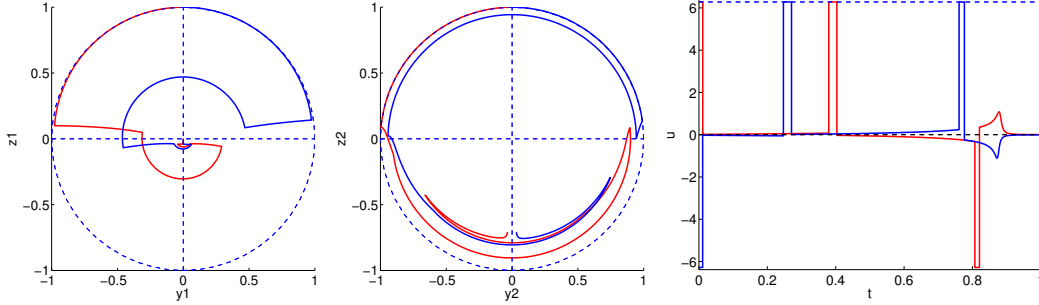


FIGURE 3.27 – **Cas du fluide.** Solution no. 1 et 2 pour $\lambda = 1.0$ ($t_f = 1.035 \times \min t_f$). Le contraste est identique pour les deux branches et vaut 0.709. Trajectoires des spins 1 et 2 et les contrôles associés. La solution issue de la branche no. 1 est en bleu et celle issue de la branche no. 2 est en rouge.

Pour conclure, pour le cas du liquide cérébrospinal/eau, la stratégie sous-optimale la meilleure que l'on ait trouvée, est à une symétrie près la suivante :

- d'abord $\xi_+ \xi_s \xi_+ \xi_s$ pour $t_f \in [1, 1.008]T_{\min}$,
- puis $\xi_+ \xi_s \xi_+ \xi_s \xi_- \xi_s$ pour $t_f \in]1.008, 1.035]T_{\min}$,
- puis $\xi_- \xi_s \xi_+ \xi_s \xi_+ \xi_s$ pour $t_f \in]1.035, 1.225]T_{\min}$
- et enfin $\xi_- \xi_s \xi_+ \xi_s$ pour $t_f \in]1.225, 2]T_{\min}$.

3.7 Synthèse des résultats

Retour au cas du sang désoxygéné/oxygéné

Nous avons rencontré des structures pour le cas du fluide plus complexes que celles des solutions trouvées dans le cas du sang. Il est alors naturel de se demander si partant des résultats du cas du fluide, nous retrouvons ou non ceux du sang. Nous effectuons donc une continuation affine sur les paramètres et le temps final, du fluide vers le sang. Nous nous attendons à détecter un changement de structure de $2BS$ vers BS , pour t_f fixé à $1.5T_{\min}$, si le chemin permet de retrouver la solution connue. Nous faisons tout d'abord une continuation de la solution no. 1, $\xi_- \xi_s \xi_+ \xi_s$, cf. Table 3.5, calculée en $t_f = 1.5T_{\min}$ vers le problème du sang désoxygéné/oxygéné. On retrouve la trajectoire et le contrôle Fig. 3.28. On remarque que la solution obtenue est $3BS$ avec les deux premiers arcs de signe opposé. On a donc découvert une nouvelle branche de solutions. Le contraste est de 0.484, ce qui est meilleur que celui de la solution BS connue, qui est de l'ordre de 0.466. Nous réalisons ensuite une continuation de la solution no. 2 $\xi_+ \xi_s \xi_+ \xi_s$, cf. Table 3.6, toujours pour $t_f = 1.5T_{\min}$ vers le cas du sang, car dans le problème du fluide, cette branche est meilleure que la précédente pour de petits t_f . On retrouve la trajectoire et le contrôle Fig. 3.29, elle aussi $3BS$ avec les deux premiers arcs positifs et donc sur une nouvelle branche. Le contraste est de 0.482, ce qui est meilleur que celui de la solution BS mais légèrement inférieur à l'autre solution $3BS$.

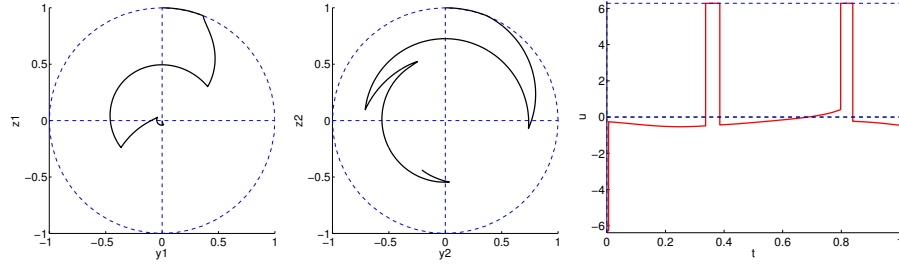


FIGURE 3.28 – **Cas du sang.** Trajectoires et contrôle pour la solution $\xi - \xi_s \xi + \xi_s \xi + \xi_s$ obtenue par continuation depuis la solution no. 1, $\xi - \xi_s \xi + \xi_s$, du problème du fluide, pour $t_f = 1.5 \times \min t_f$. Le contraste est de 0.484. Les instants de commutations sont $(0.00593060227, 0.33709780581, 0.3854435650, 0.7976181372, 0.8390614486)$ et le vecteur adjoint est $p(0) = (-0.0479213968, -0.0102656882, 0.0486273667, 0.2143076148)$.

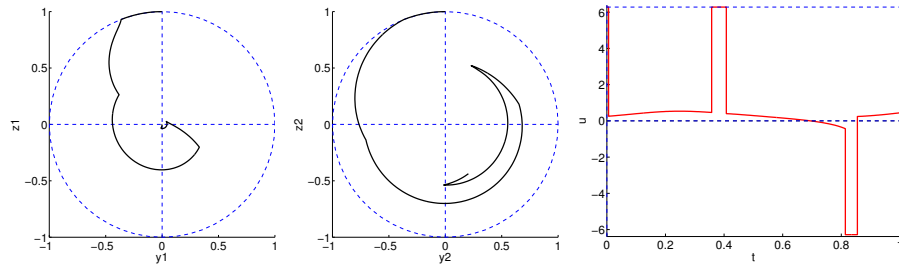


FIGURE 3.29 – **Cas du sang.** Trajectoires et contrôle pour la solution $\xi + \xi_s \xi + \xi_s \xi - \xi_s$ obtenue par continuation depuis la solution no. 2, $\xi + \xi_s \xi + \xi_s$, du problème du fluide, pour $t_f = 1.5 \times \min t_f$. Le contraste est de 0.482. Les instants de commutations sont $(0.0059194108, 0.3576009169, 0.4077507719, 0.8137764537, 0.8547897399)$ et le vecteur adjoint est $p(0) = (0.0474453396, -0.0107226094, -0.0481428592, 0.2150042435)$.

On considère la solution Fig. 3.28 et on étudie l'influence du temps final sur celle-ci. Le contraste et le chemin lui-même (le vecteur adjoint initial et les instants de commutations) sont donnés Fig. 3.30. On remarque un changement de structure de $3BS$ à $2BS$ après la présence du turning point. La meilleure structure sur cette branche reste $3BS$ quel que soit le temps final. On fait ensuite la même étude pour la branche venant de la solution $\xi + \xi_s \xi + \xi_s \xi - \xi_s$, cf. Fig. 3.31. On note qu'ici le chemin s'arrête après le turning point observable sur le sous-graphe du centre. La structure optimale sur cette branche est $3BS$ pour tout t_f avec les deux premiers arcs bangs positifs.

Finalement, on rassemble Fig. 3.32 les résultats des deux branches calculées précédemment avec ceux de la branche BS , cf. Fig. 3.13. D'après la courbe du contraste, la meilleure synthèse sous-optimale trouvée, à une symétrie près, est alors la suivante :

- d'abord $\xi + \xi_s$ pour $t_f \in [1, 1.294]T_{\min}$,
- puis $\xi - \xi_s \xi + \xi_s \xi + \xi_s$ pour $t_f \in]1.294, 2]T_{\min}$.

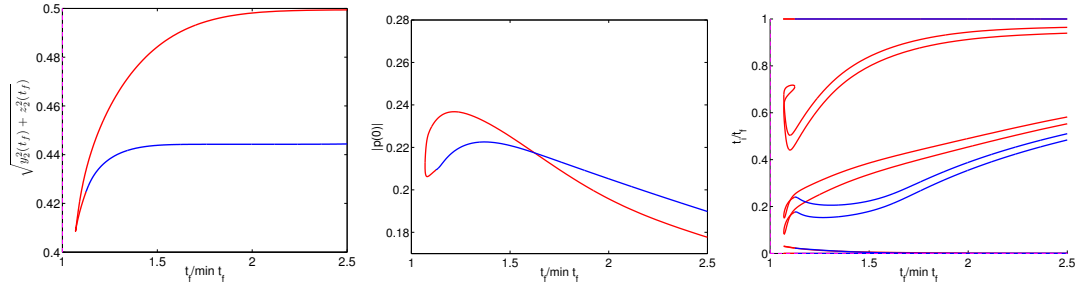


FIGURE 3.30 – **Cas du sang.** Contraste, vecteur adjoint initial et instants de commutations en fonction de t_f . Branche obtenue à partir de la solution $\xi_- \xi_s \xi_+ \xi_s \xi_+ \xi_s$, Fig. 3.28. La partie bleue pour une stratégie 2BS et rouge pour 3BS.

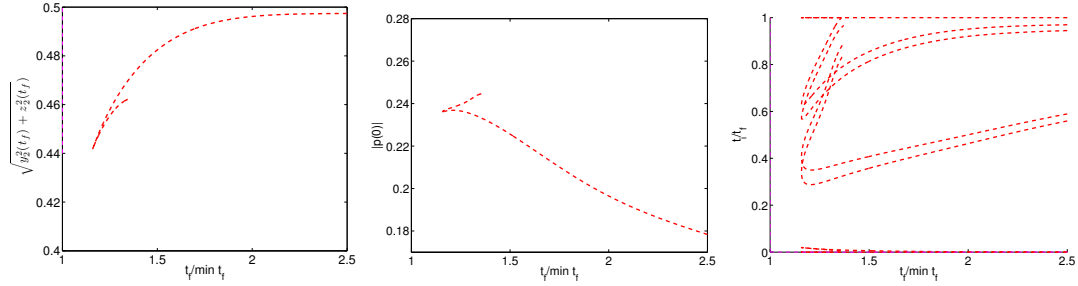


FIGURE 3.31 – **Cas du sang.** Contraste, vecteur adjoint initial et instants de commutations en fonction de t_f . Branche obtenue à partir de la solution $\xi_+ \xi_s \xi_+ \xi_s \xi_- \xi_s$, Fig. 3.29. La partie rouge représente une stratégie 3BS.

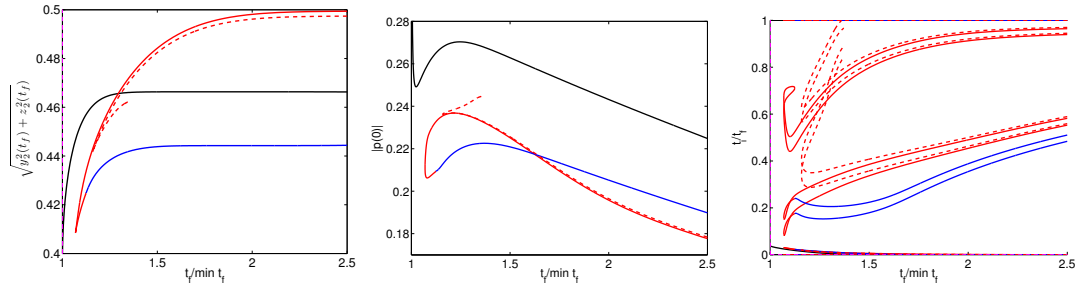


FIGURE 3.32 – **Cas du sang.** Contraste, vecteur adjoint initial et instants de commutations en fonction de t_f . Branches obtenue à partir des solutions $\xi_- \xi_s \xi_+ \xi_s \xi_+ \xi_s$ (trait plein), Fig. 3.28, $\xi_+ \xi_s \xi_+ \xi_s \xi_- \xi_s$ (tirets), Fig. 3.29 et branche BS présentée Fig. 3.13 en noir. La partie bleue pour une stratégie 2BS et rouge pour 3BS.

Synthèses schématiques pour les cas du sang et du fluide

On donne pour conclure, sous forme schématique, la synthèse des solutions localement optimales obtenues ici grâce à l'étude géométrique issue du principe du maximum de Pontryagin et grâce à l'étude numérique du problème de contraste, pour le cas du sang désoxygéné/oxygéné Fig. 3.33 et pour le cas du liquide cérébrospinal/eau Fig. 3.34.

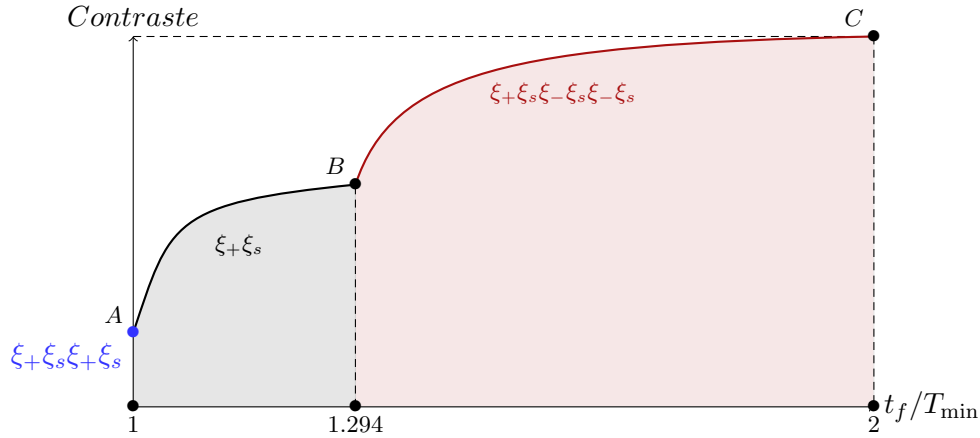


FIGURE 3.33 – **Cas du sang.** Synthèse des solutions localement optimales. La solution en A se trouve Fig. 3.18. Les solutions en B et C sont données en annexe-A. La solution en $t_f = 1.1T_{\min}$ peut se retrouver Fig. 3.12 et Table 3.4, tandis que la solution en $t_f = 1.5T_{\min}$ est détaillée Fig. 3.28. On observe en B un changement de branche pour le chemin de zéros se traduisant par une perte de régularité sur la fonction valeur. Cette situation est de nature globale. Deux branches se croisent avec le même coût, le vecteur adjoint en l'instant initial étant bien distinct en ce point pour chaque branche.

Conclusion

Le principe du maximum de Pontryagin nous a permis de découvrir l'importance des trajectoires singulières dans le problème de contraste. Ces trajectoires jouant déjà un rôle fondamental pour le problème temps minimal à un seul spin. L'étude préliminaire du flot singulier montre la potentielle attractivité du pôle nord et les nombreuses géométries possibles du lieu où le contrôle part à l'infini. En couplant les méthodes géométriques à un premier algorithme, il a été possible de trouver rapidement des solutions *BS* respectant à 10^{-4} près les conditions de transversalités. Les techniques de régularisation auront permis de calculer de nombreuses extrémales (*BS* et *2BS*) dont les différentes stratégies viennent des quasi-symétries du problème. En utilisant de manière approfondie les méthodes homotopiques, nous avons découvert de nombreuses branches, et une première synthèse sous-optimale montre l'importance des structures

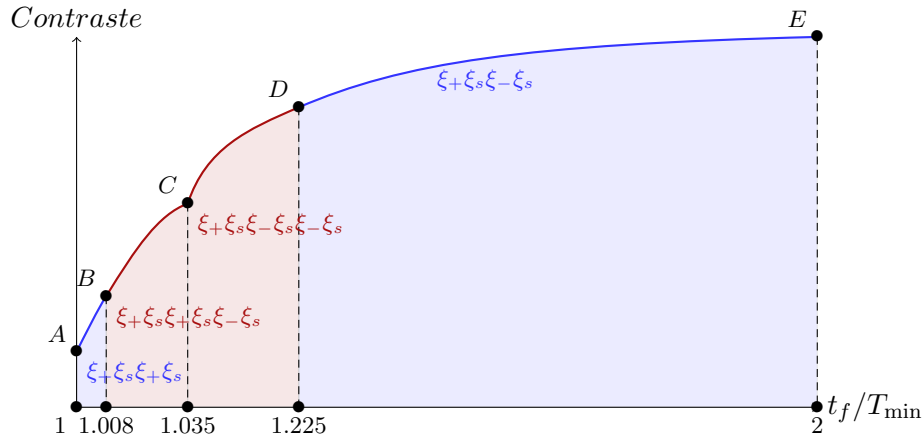


FIGURE 3.34 – **Cas du fluide.** Synthèse des solutions localement optimales. Les solutions en A, B, D et E sont données en annexe-A. Les solutions en C sont regroupées sur le même graphe Fig. 3.27. La solution en $t_f = 1.5T_{\min}$ peut se retrouver Fig. 3.22 et Table 3.5. On observe en C un changement de branche pour le chemin de zéros se traduisant par une perte de régularité sur la fonction valeur. Cette situation est de nature globale. Deux branches se croisent avec le même coût, le vecteur adjoint en l’instant initial étant bien distinct en ce point pour chaque branche. En les points B et D, on retrouve la notion d’homotopie étendue (changement de structure $S \leftrightarrow SBS$ et donc d’espace de définition de la fonction homotopique). Le suivi est automatisé. On détecte soit l’apparition d’un nouvel arc bang par la saturation d’un arc singulier, soit on retire un arc bang si la durée de celui-ci tend vers 0.

3BS. Ces structures 3BS sont obtenues à l’aide de notre homotopie étendue. Suivant les paramètres que sont les temps de relaxation et le temps final, les solutions évoluent et les structures changent, même si pour l’instant il est difficile d’expliquer la raison de ces différentes situations. La synthèse n’étant bien évidemment que sous-optimale, il serait intéressant d’approfondir ces résultats à l’aide de méthodes numériques globales. Un travail en cours, utilisant les méthodes LMI (voir l’article Réf. [LHPT08] consacré au contrôle optimal avec contrôle borné et Réf. [Las09] qui explique la méthode générale) permettra, à une approximation près, de connaître la valeur maximale possible pour le contraste (en fonction des paramètres), sans toutefois donner la trajectoire optimale associée. Des résultats préliminaires pour $t_f \in [T_{\min}, 2T_{\min}]$ donne une borne supérieure approximative de l’ordre de 0.57 (contre 0.5 pour notre synthèse) dans le cas du sang et 0.85 (contre 0.8 pour notre synthèse) dans le cas du fluide. Ces résultats donne une information importante sur la valeur limite que l’on peut atteindre. Cependant le caractère encore trop approximatif de ceux-ci ne permet pas en l’état d’affirmer ou non si notre synthèse sous-optimale est en réalité bien optimale.

CHAPITRE 4

Minimisation de l'énergie en contrôle quantique dissipatif à deux niveaux d'énergie : le cas intégrable

Dans ce chapitre, on s'intéresse aux calculs de lieux conjugués et de coupure appliqué au contrôle quantique. On reprend l'étude Réf. [BCC11] d'un système quantique dissipatif à deux niveaux d'énergie, modélisé par les équations de Lindblad. Le contrôle peut être vu comme l'action d'un laser sur la rotation d'une molécule en phase gazeuse, ou comme l'effet d'un champ magnétique sur des particules de spin 1/2. Pour la minimisation de l'énergie, les extrémales normales du principe du maximum sont solutions d'un Hamiltonien en dimension trois avec paramètres. L'analyse est portée sur un sous-modèle intégrable qui définit en dehors de singularités, une métrique pseudo-riemannienne en dimension cinq. Nous présentons les calculs préliminaires des lieux conjugués et de coupure pour une restriction en dimension deux du problème.

On s'intéresse au problème de minimisation de l'énergie pour un système quantique à deux niveaux d'énergie introduit 2.3, et étudié Réfs. [BCC11, BCS11, BCSS10]. Cette section reprend le cas sphérique Réf. [BCC11], qui avec le cas méridional Réf. [BCS11], complètent les calculs dans le cas général de Réf. [BCSS10]. Nous avons donc les équations bilinéaires de Lindblad décrivant la dynamique d'un système quantique à deux niveaux d'énergie,

$$\dot{x}_1 = -\Gamma x_1 + u_2 x_3, \quad (4.1)$$

$$\dot{x}_2 = -\Gamma x_2 - u_1 x_3, \quad (4.2)$$

$$\dot{x}_3 = \tilde{\gamma} - \gamma x_3 + u_1 x_2 - u_2 x_1, \quad (4.3)$$

où $2\Gamma \geq \gamma \geq |\tilde{\gamma}|$ sont les paramètres de dissipations modélisant l'interaction avec l'environnement (*e.g.*, les collisions entre molécules). L'état $x \in \mathbb{R}^3$ représente dans un système de coordonnées bien choisi, la matrice densité du système quantique. Le contrôle $u = (u_1, u_2) \in \mathbb{R}^2$ peut être interprété comme un champ électromagnétique.

Les intérêts récents de tels problèmes viennent de plusieurs applications. Parmi elles, nous pouvons mentionner l'alignement moléculaire en phase gazeuse via un champ laser, ou encore le contrôle de la dynamique de particules de spin $1/2$ en phase liquide par résonance magnétique nucléaire. Le cas conservatif (sans dissipation) a été étudié dans plusieurs papiers (voir par exemple, Réfs. [BCG⁺02, KGB05]). On se concentre ici à la situation plus complexe en présence de dissipation. Alors que le problème à temps minimal est étudié Réf. [BCS09, BS12], on considère le critère de l'énergie,

$$\int_0^{t_f} (u_1^2 + u_2^2) dt \rightarrow \min,$$

sans borne sur le contrôle. Les résultats d'existence pour ce problème sont donnés Réf. [BCSS10, BS12], ainsi que des calculs analytiques de trajectoires optimales dans un sous-cas particulier intégrable de ce modèle, en terme de fonctions elliptiques de Jacobi. Dans la section suivante, on rappelle l'application du principe du maximum de Pontryagin et on réduit l'étude à un sous-modèle hamiltonien intégrable (avec paramètres) sur la deux-sphère. Enfin, la dernière section est dédiée à l'analyse préliminaire des lieux conjugués et de coupure du sous-modèle.

4.1 Extrémales normales

Selon le principe du maximum de Pontryagin, les trajectoires optimales sont les projections sur l'espace d'état des extrémales solutions dans $T^*\mathbb{R}^3$ du système hamiltonien suivant,

$$H(x, p) = p^0(u_1^2 + u_2^2) + H_0 + u_1H_1 + u_2H_2.$$

Ici, $p^0 \leq 0$ est un paramètre, (x, p) sont des coordonnées sur le fibré cotangent, et $H_i = \langle p, F(x) \rangle$, $i = 0, 2$, sont les relèvements hamiltoniens des champs de vecteurs définissant la dynamique (4.1-4.3),

$$\dot{x} = F_0(x) + u_1F_1(x) + u_2F_2(x)$$

avec

$$F_0 = -\Gamma(x_1 \frac{\partial}{\partial x_1} + x_2 \frac{\partial}{\partial x_2}) + (\tilde{\gamma} - \gamma x_3) \frac{\partial}{\partial x_3},$$

$$F_1 = -x_3 \frac{\partial}{\partial x_2} + x_2 \frac{\partial}{\partial x_3}, \quad F_2 = x_3 \frac{\partial}{\partial x_1} - x_1 \frac{\partial}{\partial x_3}.$$

De plus, le Hamiltonien doit être maximisé presque partout par rapport à u le long de l'extrémale. Il est homogène en (p^0, p) et il y a deux situations possibles : le cas normal $p^0 \neq 0$, et le cas anormal $p^0 = 0$. Se restreignant aux extrémales normales, (voir Réf. [BCSS10] pour les anormales) et normalisant p^0 à $-1/2$, la condition de maximisation mène à $u = (H_1, H_2)$ qui permet d'exprimer le contrôle comme une

fonction de (x, p) . On remplace cette fonction dans H pour définir le Hamiltonien vrai du problème,

$$H = H_0 + \frac{1}{2}(H_1^2 + H_2^2).$$

On fait le changement de variables suivant, passant alors en coordonnées sphérique,

$$(x_1, x_2, x_3) = e^r (\sin \varphi \cos \theta, \sin \varphi \sin \theta, \cos \varphi),$$

et on introduit $\delta = \Gamma - \gamma$. Alors,

$$H_0 = -(\delta \sin^2 \varphi + \gamma)p_r - \delta \cos \varphi \sin \varphi p_\varphi - \tilde{\gamma} e^{-r} (p_r \cos \varphi - p_\varphi \sin \varphi).$$

$$H_1 = -\frac{p_\theta}{\tan \varphi}, \quad H_2 = p_\varphi.$$

Proposition 4.1. *Pour $\tilde{\gamma} = 0$, le système est Liouville intégrable.*

Démonstration. Puisque les coordonnées r et θ sont cycliques, p_r et p_θ définissent deux intégrales premières linéaires supplémentaires. \square

Le Hamiltonien est quadratique en $(p_r, p_\theta, p_\varphi, \delta, \gamma, \tilde{\gamma})$, et il est facile de vérifier qu'il est dégénéré n'importe où en tant que forme en dimension six. Néanmoins, se restreignant au sous-modèle intégrable,

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2} \frac{p_\theta^2}{\tan^2 \varphi} + \frac{1}{2} (p_\varphi - \delta \cos \varphi \sin \varphi)^2 - \frac{1}{2} (\delta \cos \varphi \sin \varphi + p_r \tan \varphi)^2 \\ &+ \frac{1}{2} (p_r \tan \varphi - \frac{\gamma}{\tan \varphi})^2 - \frac{1}{2} \frac{\gamma^2}{\tan^2 \varphi}. \end{aligned}$$

Les paramètres δ et γ peuvent être interprétés comme duals aux variables cycliques, et l'on a le résultat suivant.

Proposition 4.2. *Le sous-modèle intégrable définit une métrique pseudo-riemannienne (3, 2) en dimension cinq avec une singularité en $\varphi = \pi/2$. La restriction à $p_r = 0$ est lorentzienne en dimension trois en dehors de la singularité.*

Démonstration. Le déterminant de la forme quadratique en $(p_r, p_\theta, p_\varphi, \delta, \gamma)$ est égale à $\cos^4 \varphi$. \square

4.2 Intégration du flot

On peut retrouver dans Réf. [BCC11], la méthode pour calculer de manière analytique, par les fonctions de Weierstraß, les extrémales solutions du sous-modèle intégrable. On rappelle ici la quadrature obtenue.

Proposition 4.3. *Les trajectoires du flot normal dans le cas intégrable sont les suivantes,*

$$\begin{aligned}\sin^2 \varphi &= 1 - \frac{1}{\wp(\xi t + z_0) - a}, & \wp(z_0) &= a + \frac{1}{\cos^2 \varphi_0}, \\ \theta &= \theta_0 + \frac{p\theta}{\wp'(z_1)} \left[2\zeta(z_1)t + \frac{1}{\xi} \ln \frac{\sigma(\xi t + z_0 - z_1)}{\sigma(\xi t + z_0 + z_1)} \right]_0^t, & z_1 \text{ t.q. } \wp(z_1) &= a + 1, \\ r &= r_0 - (\delta + \gamma)t \\ &\quad + \frac{\delta}{\wp'(z_2)} \left[2\zeta(z_2)t + \frac{1}{\xi} \ln \frac{\sigma(\xi t + z_0 - z_2)}{\sigma(\xi t + z_0 + z_2)} \right]_0^t, & z_2 \text{ t.q. } \wp(z_2) &= a,\end{aligned}$$

avec les invariants de Weierstraß et a une constante définie par les paramètres du problème (voir Réf. [BCC11]). On note τ (resp. T) la période de $\sin^2 \varphi$ (resp. de φ).

- (i) Quand $\xi^2 > 0$, $\tau = 2\omega/\xi$ et $T = 2\tau$ (extrémales grandes).
- (ii) Quand $\xi^2 < 0$, $\tau = 2\omega'/\xi$ et $T = \tau$ (extrémales petites).

4.3 Lieux conjugué et de coupure

On rappelle les notions standards suivantes en géométrie riemannienne Réf. [Ber03] et contrôle optimal. Un *point de coupure* est le premier point (s'il existe) le long d'une extrémale tel que l'extrémale cesse d'être minimisante. Soit une condition initiale x_0 , le *lieu de coupure* est l'ensemble de tels points le long des extrémales partant de x_0 . Un point $x(t_c)$ sur une extrémale $z = (x, p)$ est conjugué à x_0 s'il existe un champ de Jacobi $\delta z = (\delta x, \delta x)$, solution du système linéarisé le long de l'extrémale,

$$\delta \dot{z} = d\vec{H}(z(t))\delta z, \quad \vec{H} = (\partial_p H, -\partial_x H),$$

qui est non-trivial ($\delta x \not\equiv 0$) et vertical à $t = 0$ et t_c , $\delta x(0) = \delta x(t_c) = 0$. Le *lieu conjugué* est l'ensemble de tels premiers points sur les extrémales partant de x_0 . La notion de point conjugué est classiquement liée à l'optimalité locale des extrémales dans des topologies significatives.

On se focalise sur la restriction à $p_r = 0$ du cas intégrable. Selon la proposition 4.2, le Hamiltonien résultant

$$H = \frac{1}{2} \frac{p_\theta^2}{\tan^2 \varphi} + \frac{1}{2} (p_\varphi - \delta \cos \varphi \sin \varphi)^2 - \frac{1}{2} \delta^2 \cos^2 \varphi \sin^2 \varphi \quad (4.4)$$

définit une métrique lorentzienne en dimension trois avec une singularité en $\varphi = \pi/2$, et décrit le système de contrôle lorsque la coordonnée r n'est pas prise en compte. La métrique est même riemannienne sur \mathbf{S}^2 quand $\delta = 0$ (avec la même singularité en l'équateur) et a été étudiée Réfs. [BC11, BCST09], de telle sorte que (4.4) peut aussi s'interpréter comme une déformation de type Zermelo (présence d'une dérive) de la situation riemannienne lorsque $\delta > 0$.

Théorème 4.1. (Voir Figs. 4.1-4.2.) Soit $p_r = \delta = 0$. (i) Quand $\varphi_0 \neq \pi/2$, le lieu de coupure est une unique branche antipodale et le lieu conjugué est une astroïde avec deux cusps horizontaux et deux verticaux. (ii) Quand $\varphi_0 = \pi/2$, le lieu de coupure est l'équateur privé du point initial et le lieu conjugué est en forme de double coeur avec quatre cusps verticaux.

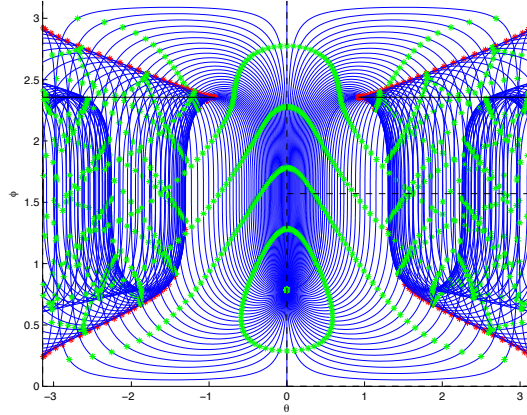


FIGURE 4.1 – Lieux conjugué et de coupure, $p_r = 0$, $\delta = 0$, $\varphi_0 = \pi/4$. Géodésiques en bleu, iso-coût en vert, lieu de coupure en noir, lieu conjugué en rouge. Le lieu de coupure est une unique branche fermée (les deux moitiés se rejoignent en $\theta = \pm\pi$) incluse dans le parallèle antipodal, $\varphi = \pi - \varphi_0$. Le lieu conjugué a deux cusps horizontaux et deux verticaux (comme une astroïde sur la sphère).

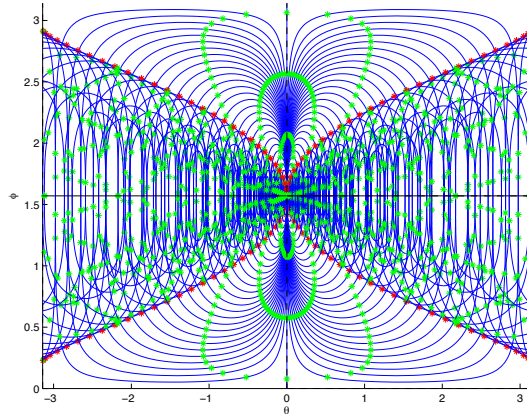


FIGURE 4.2 – Lieux conjugué et de coupure, $p_r = 0$, $\delta = 0$, $\varphi_0 = \pi/2$. Géodésiques en bleu, iso-coût en vert, lieu de coupure en noir, lieu conjugué en rouge. Pour la condition initiale en la singularité, le lieu de coupure est l'équateur en entier privé du point de départ. Le lieu conjugué a quatre cusps verticaux (en forme de double coeur sur la sphère, voir Réf. [BCST09]).

Pour $\delta > 0$, on exclut le cas singulier $\varphi_0 = \pi/2$ et fournit quelques résultats numériques préparatoires sur la structure des lieux conjugué et de coupure. Le résultat suivant est clair (voir Fig. 4.3).

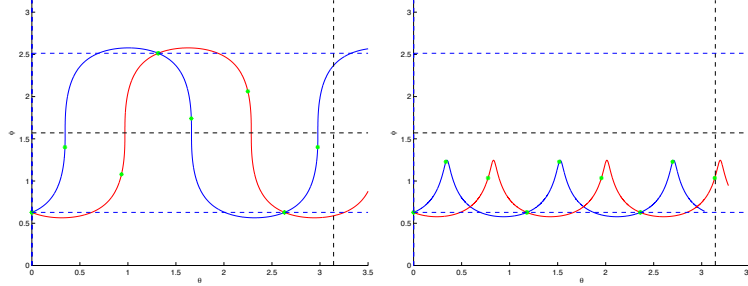


FIGURE 4.3 – Des extrémals s'intersectant, avec la symétrie $\pm\dot{\varphi}(0)$. Une paire d'extrémals grandes ($\xi^2 > 0$) sur la gauche, une paire de petites ($\xi^2 < 0$) sur la droite, chacune s'intersectant avec le même coût pour t_f égal à la période de $X = \sin^2 \varphi$. Dans chacun des cas, les extrémals s'intersectant appartiennent au même niveau du Hamiltonien. Ces intersections génèrent des points de coupure I.a (pour les grandes) et I.b (pour les petites), voir Figs. 4.5-4.9. Ces points appartiennent respectivement à la ligne antipodale $\varphi = \pi - \varphi_0$ et à $\varphi = \varphi_0$.

Proposition 4.4. *Des paires d'extrémals normales du sous-modèle intégrable définies par $\pm\dot{\varphi}(0)$ s'intersectent en $t = \tau$ avec le même coût. Les intersections sont antipodales sur $\varphi = \pi - \varphi_0$ pour les extrémals grandes, et sur $\varphi = \varphi_0$ pour les petites.*

Concernant les intersections des extrémals petites, il existe un autre phénomène en comparaison du cas riemannien ($\delta = 0$). Il existe en effet des extrémals s'intersectant avec le même coût (et temps) appartenant à différents ensembles de niveau pour le Hamiltonien, comme il l'est illustré par la Fig. 4.4.

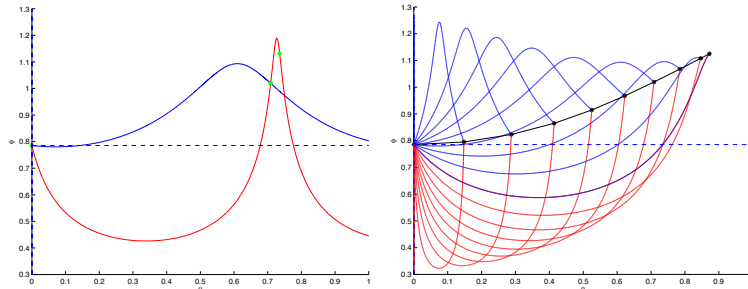


FIGURE 4.4 – Des extrémals petites s'intersectant pour différents niveaux du Hamiltonien avec le même coût, $p_r = 0$, $\delta = 4$, $\varphi_0 = \pi/4$. À gauche, la première intersection arrive en $t_f = 1$ pour $h \simeq -1.095$ (bleu) et $h \simeq -9.486e^{-1}$ (rouge), respectivement. À droite, une famille entière de telles paires s'intersectant en $t_f = 1$ avec le même coût est affichée. Ces intersections génèrent la partie II du lieu de coupure, voir Figs. 4.5-4.9.

Dans la situation riemannienne, on peut se restreindre au niveau $H = 1/2$ et paramétriser les géodésiques par l'abscisse curviligne. De manière équivalente, on peut fixer le temps final et obtenir les géodésiques en faisant varier le niveau de H . Dans le cas lorentzien, la deuxième approche garde son sens. On normalise le temps final à $t_f = 1$ et on considère les h -courbes générées en faisant varier le niveau de H . Plus précisément, en se restreignant à $p_r = 0$ et en ayant fixé $\delta > 0$ et $\varphi_0 \neq \pi/2$, on paramétrise $T_{(0,\varphi_0)}^* \mathbf{S}^2$ (θ_0 est fixé à zéro) selon

$$\frac{p_{\theta_0}}{\tan \varphi_0} + i(p_{\varphi_0} - \delta \cos \varphi_0 \sin \varphi_0) = \rho e^{i\alpha}, \quad 2h + \delta^2 \cos^2 \varphi_0 \sin^2 \varphi_0 = \rho^2. \quad (4.5)$$

Pour chaque direction α du vecteur adjoint initial est associé une h -courbe,

$$h \mapsto \exp_{\varphi_0, \delta}(h, \alpha)$$

où l'exponentielle est la projection sur l'espace d'état (θ, φ) de la courbe intégrale de H avec comme condition initiale $(0, \varphi_0, p_{\theta_0}, p_{\varphi_0})$, l'adjoint initial étant défini par (h, α) en accord avec (4.5). Ces h -courbes sont évaluées numériquement, et des points conjugués arrivant en t_f sont calculés par Réf. [CCG10] le long de ces courbes. On peut ainsi obtenir la section à $t = t_f$ du lieu conjugué, ainsi que les lignes d'iso-coût ou *front d'ondes*. Les résultats sont présentés Figs. 4.5-4.9 et fournissent une première vision de la structure des lieux conjugué et de coupure pour des valeur positive de δ . En particulier, les points de coupure antipodaux labélisés I.a analogues à ceux du cas riemannien sont préservés. La même symétrie sur les extrémales petites génère les points de coupure I.b, si δ est suffisamment grand. (On compare $\delta = 4$ et $\delta = 5.6$ Figs. 4.5-4.7.) Les résultats pour des valeurs plus grandes de δ indiquent une structure plus complexe des lieux conjugué et de coupure (voir Figs. 4.8 et 4.9).

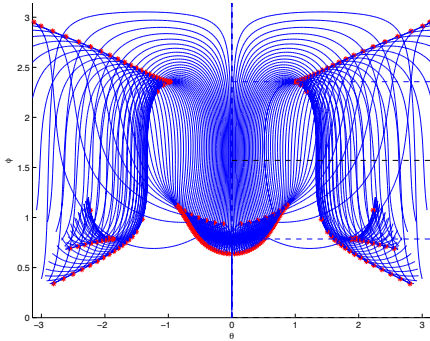


FIGURE 4.5 – H-courbes et lieu conjugué, $p_r = 0$, $\delta = 4$, $\varphi_0 = \pi/4$. Le lieu conjugué (rouge) est l'enveloppe des h-courbes (bleu). Les quatre cusps (deux horizontaux et deux verticaux) du lieu conjugué sont préservés (la partie astroidale à comparer avec Fig. 4.1, $\delta = 0$) tandis qu'une nouvelle composante en forme de sourire avec deux singularités de type cusp apparaît sur le lieu. De petites parties du second lieu conjugué sont aussi affichées.

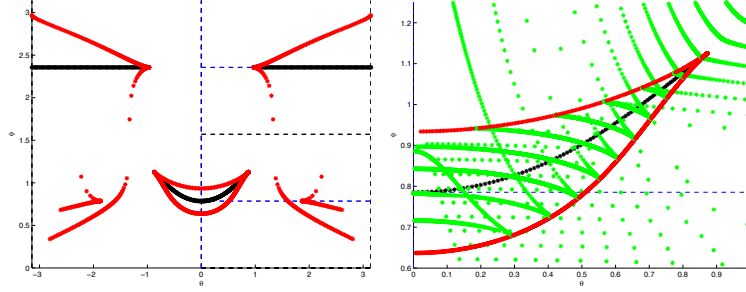


FIGURE 4.6 – Lieux de coupure et conjugué, front d'ondes, $p_r = 0$, $\delta = 4$, $\varphi_0 = \pi/4$. À gauche, la partie antipodale I.a du lieu de coupure (noir) est préservée (à comparer avec Fig. 4.1, $\delta = 0$). La nouvelle composante II avec des extrémités localisées aux singularités de la partie en forme de sourire du lieu conjugué apparaît. À droite, les lignes d'iso-coût (vert) définissant le front d'ondes sont affichées. Les intra-intersections du front d'ondes définissent les points de coupure II (noir) tandis que ses singularités se retrouvent le long du lieu conjugué (rouge).

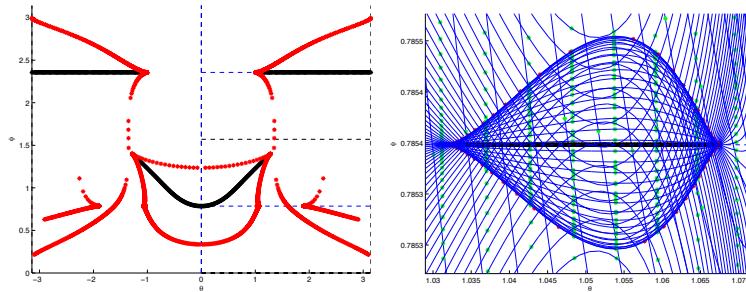


FIGURE 4.7 – Lieux de coupure et conjugué, h-courbes, $p_r = 0$, $\delta = 5.6$, $\varphi_0 = \pi/4$. À gauche, l'astroïde et la forme de sourire du lieu conjugué sont préservés (à comparer avec Fig. 4.6, $\delta = 4$). Deux nouvelles composantes (symétrie par rapport à $\theta = 0$) du lieu conjugué apparaissent (détaillées sur le sous-graphe de droite), déformant légèrement la partie en forme de sourire dans leur voisinage. À droite, détail des h-courbes (bleu) générant une nouvelle composante (celle de droite, $\theta \geq 0$) du lieu conjugué (rouge) avec deux cusps horizontaux. La nouvelle composante correspondante du lieu de coupure (noir) se forme à ses extrémités localisées en ses singularités. C'est une unique branche incluse dans le parallèle $\varphi = \varphi_0$ formé par les points de coupure I.b (intersections des extrémals petites symétriques, voir Fig. 4.3). La même chose est observée pour $\theta \leq 0$.

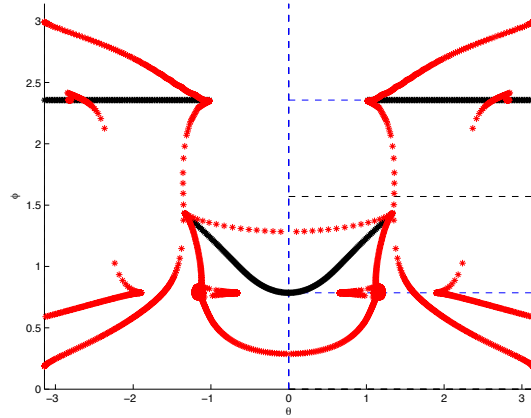


FIGURE 4.8 – Lieux conjugué et de coupure, $p_r = 0$, $\delta = 6$, $\varphi_0 = \pi/4$. La partie astéroïdale du lieu conjugué (rouge) est préservée tandis que de nouvelles singularités et intra-intersections sur la partie en forme de sourire apparaissent (détaillées Fig. 4.9). Un des cusps de chacune des deux nouvelles composantes observées Fig. 4.7 disparaît. Les parties I.a et II du lieu de coupure (noir) sont préservées.

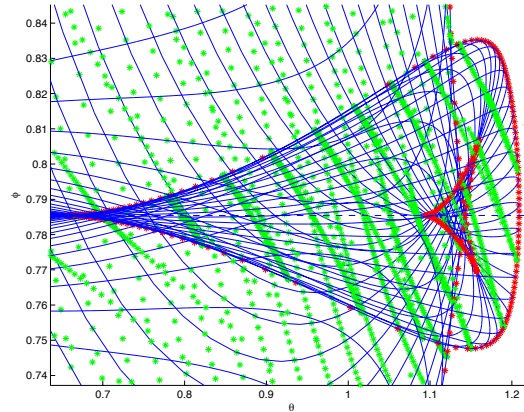


FIGURE 4.9 – H-courbes, lieu conjugué et front d'ondes, $p_r = 0$, $\delta = 6$, $\varphi_0 = \pi/4$ (détail). La partie en forme de sourire du lieu conjugué (rouge) s'intersecte elle-même maintenant et a trois cusps de plus sur sa partie droite (la même chose est observée pour $\theta \leq 0$), suggérant une structure plus complexe du lieu de coupure dans son voisinage. La nouvelle composante de droite du lieu conjugué observée pour $\delta = 5.6$ n'a maintenant qu'un cusp. Les singularités en épingle du front d'ondes (vert) suggèrent que la partie des points de coupure de type I.b persistent sur $\varphi = \varphi_0$.

Conclusion

Bilan des contributions Le fil conducteur de cette étude est donc l'utilisation des méthodes homotopiques et l'application des conditions nécessaires ou suffisantes du deuxième ordre. La première contribution aura donc été la réalisation d'un code performant et disponible, donc simple d'utilisation, basé sur le principe du maximum de Pontryagin, utile pour la résolution de familles de problèmes de contrôle optimal. Ce programme contient un ensemble de fonctions permettant l'étude de problèmes suffisamment généraux (*i.e.* dont les contrôles optimaux peuvent être lisses, bang-bang, bang-singulier. . .). La principale caractéristique vient de la méthode homotopique différentielle originale basée sur l'expression du Hamiltonien, d'où le nom `HAMPATH`. Le calcul des champs de Jacobi continus ou discontinus, permet la vérification des conditions du deuxième ordre. `HAMPATH` rassemble de nombreuses bibliothèques et routines telles que `Minpack`, `Lapack`, `Blas`, `dopri5`, `hybrj` et `Tapenade`. Dans un premier temps, à partir du Hamiltonien maximisé et des conditions de transversalité, `HAMPATH` génère par différentiation automatique les équations d'états et adjointes ainsi que les équations variationnelles requises dans le calcul des dérivées. Il compile ensuite les codes `Fortran` décrivant le problème, fournissant alors une collection de fonctions `Matlab` qui permettent dans le cas lisse (i) de résoudre un problème donné grâce aux méthodes de tir, (ii) de résoudre une famille de problèmes dépendant continûment d'un paramètre, par des méthodes homotopiques différentielles et (iii) de calculer les solutions des équations de Jacobi le long d'extrémales afin de tester les conditions d'optimalité du second ordre. À cela, il a été rajouté pour traiter le cas non lisse, (i) une méthode de tir multiple qui aura permis la résolution de problèmes où le contrôle est composé d'arcs bang et singuliers et (ii) une méthode de tir simple avec détections des commutations et calcul des champs de Jacobi discontinus, pour la résolution de problèmes exclusivement bang-bang. Il est à noter que l'homotopie différentielle fonctionne aussi dans le cas où le contrôle optimal n'est pas continu en fonction du temps. Le suivi de chemin se fait tant que la structure du contrôle n'évolue pas. Cet apport a donné lieu à une première publication [CCG11]. Par la suite, `HAMPATH` a été intensivement utilisé par B. Daoud [Dao11], et utilisé pour de nombreuses applications en mécanique quantique, [BCC11, BC12, BCG⁺12, BCS11, BCSS10].

D'un point de vue applicatif, nous avons utilisé cette approche géométrique afin d'étudier deux systèmes intervenant en mécanique quantique. Le premier système nous vient des équations de Lindblad. Nous avons présenté les résultats obtenus dans [BCC11] qui eux-mêmes complètent les apports [BCS11, BCSS10]. Dans ce cas, notre analyse porte sur un sous-modèle intégrable qui définit en dehors de singularités, une métrique

pseudo-riemannienne en dimension cinq. Nous avons présenté les calculs préliminaires des lieux conjugués et de coupure en fonction d'un paramètre naturel, pour une restriction en dimension deux du problème. L'évolution de la synthèse optimale peut être vue comme une déformation de type Zermelo (présence d'une dérive) de la situation riemannienne. La déformation préserve les branches des lieux conjugués et de coupure de la situation riemannienne et en fait apparaître de nouvelles. La particularité observée dans ce cas non riemannien, est que des trajectoires se recoupent en le même point avec des niveaux du hamiltonien différents. Enfin pour le problème de contraste en imagerie médicale présenté au chapitre 3, une étude préliminaire nous permet de mettre en évidence tout d'abord les structures complexes des solutions optimales, mais aussi les difficultés pour la résolution dues aux quasi-symétries du problème. La présence d'arcs bang et singuliers dans les contrôles optimaux nous amène à utiliser des techniques de régularisation et à utiliser des méthodes de tir multiple pour la résolution. On montre qu'avec l'analyse géométrique et les outils numériques développés, il est possible de donner une synthèse sous-optimale bien plus complète que les résultats déjà connus et plus proche de la synthèse optimale. D'un autre côté, l'étude du flot singulier montre l'attractivité du pôle nord et les nombreuses géométries possibles du lieu où le contrôle part à l'infini. De plus, en couplant les méthodes géométriques à un premier algorithme, il a été possible de trouver rapidement des solutions BS respectant à 10^{-4} près les conditions de transversalité. Les techniques de régularisation auront permis de calculer de nombreuses extrémales (BS et $2BS$) dont les différentes stratégies viennent des quasi-symétries du problème. En utilisant de manière approfondie les méthodes homotopiques, nous avons découvert de nombreuses branches, et une première synthèse sous-optimale montre l'importance des structures $3BS$. Ces structures $3BS$ sont obtenues à l'aide de notre homotopie étendue. Suivant les paramètres que sont les temps de relaxation et le temps final, les solutions évoluent et les structures changent, même si pour l'instant il est difficile d'expliquer la raison de ces différentes situations.

Perspectives De nombreux points restent ouverts et méritent d'être mentionnés. Tout d'abord, en ce qui concerne le suivi de chemin différentiel, de manière générale, il serait intéressant de donner des hypothèses significatives assurant l'existence d'au moins une branche menant à la cible voulue. L'absence de points conjugués sur tout l'ensemble de définition de la fonction homotopique permet cela mais cette hypothèse est bien trop restrictive. Au sujet de l'évolution du code `HAMPATH`, nous avons montré qu'il est possible de définir une homotopie étendue permettant le suivi du premier instant conjugué. Il serait intéressant d'implémenter cela. L'information donnée par les chemins des deux premiers instants conjugués peut avoir son importance. Si le premier instant se confond avec le second, nous n'entrons plus dans les hypothèses définies dans ce manuscrit et des situations plus complexes apparaissent. Une évolution importante serait de considérer des problèmes avec des contraintes d'état. Ici le tir multiple permet-

trait la résolution si l'on connaît la structure. On peut se demander si la régularisation permettrait encore une fois de capturer la structure des solutions dans ce cas.

Ensuite en ce qui concerne le problème de contraste en imagerie médicale, de nombreuses homotopies ont été réalisées. On remarque que la régularisation $L^{2-\lambda}$ permet de détecter la structure de certaines solutions et d'initialiser la méthode de tir multiple. Il semble que le chemin de la norme du vecteur adjoint initial du régularisé converge vers la solution bang-singulière pour le problème du sang. Il en va de même pour le coût. Cependant la suite des premiers instants conjugués ne semble pas converger vers le premier instant conjugué du non régularisé. Il serait donc pertinent d'étudier la convergence de ces chemins plus en détail. Il a été donné une condition du deuxième ordre pour des solutions de type bang-singulier dans le cas particulier de notre problème sous la forme de Mayer. On pourrait développer cette condition pour des structures plus complexes ou encore pour la même structure avec un coût de type Lagrange. Des premiers résultats sont donnés [PS05, PS08] pour un problème bang-singulier à temps minimal avec un contrôle scalaire. Ensuite, il faut encore améliorer nos connaissances sur les synthèses sous-optimales données dans les cas du sang et du fluide. La synthèse n'étant bien évidemment que sous-optimale, nous avons cherché quelques résultats préliminaires obtenus par des techniques se basant sur les moments (méthodes LMI), nous permettant de connaître la valeur maximale possible pour le contraste (en fonction des paramètres et à une erreur près non déterminée). Ces résultats donne une information importante sur la valeur limite que l'on peut atteindre. Cependant le caractère encore trop approximatif de ceux-ci ne permet pas en l'état d'affirmer ou non si notre synthèse sous-optimale est en réalité bien optimale. Une utilisation plus poussées des méthodes LMI mais aussi HJB nous permettrait d'améliorer la synthèse. Puisque notre problème est de la forme Mayer et sans condition terminale sur le spin 2, connaître la projection de l'ensemble atteignable sur $q_1 = (0, 0)$ donnerait la valeur maximale possible pour le contraste. Il serait par la suite important de mieux comprendre l'évolution des solutions en fonctions des paramètres que sont le temps final et les temps de relaxation, car le lien entre la structure et les paramètres n'est pas naturel. Le problème à temps libre rajouterait une contrainte sur le Hamiltonien ce qui permettrait d'analyser plus facilement le flot singulier (ne dépendant plus du vecteur adjoint) et aiderait à mieux cerner la synthèse globale. Finalement, pour le problème de contraste, il serait nécessaire de faire le lien entre le système 2D et 3D. Les solutions optimales du problèmes 2D n'étant pas *a priori* optimales pour le 3D.

Pour finir, au sujet de la recherche de l'optimalité globale par l'étude du flot hamiltonien, développé dans le cadre des équations de Lindblab pour un problème de minimisation de l'énergie, des études concernant le contrôle d'attitude du corps solide sont en cours. En analogie avec ce qui a été présenté au chapitre 4, on analyse les lieux conjugués et de coupure pour le système du corps solide dans des cas réduits. Voir les travaux en cours [BCPS12, BCS12].

 ANNEXE A

Étude du flot singulier, calcul de solutions Bang-Singulières et solutions particulières pour le problème de contraste

Etude du flot singulier et calcul de solutions Bang-Singulières pour le problème de contraste

Cette première section de l'annexe regroupe une première étude numérique sur le flot singulier et le calcul d'extrémales Bang-Singulières pour le problème de contraste, *cf.* §3 section 3.3.

Cas exceptionnel. a) Cas du sang désoxygéné/oxygéné. Nous allons dans ce paragraphe, voir comment se comporte le flot singulier exceptionnel, dans le cas du sang désoxygéné/oxygéné (voir Table 3.1 pour la valeur des temps de relaxation). On se pose ici plusieurs questions. On cherche à savoir tout d'abord s'il existe des singulières exceptionnelles dont le contrôle part à l'infini. De manière opposée, si l'on en trouve une dont le contrôle reste borné, on cherchera à connaître le comportement de la trajectoire lorsque le temps tendra vers l'infini. Pour savoir si les extrémales singulières ont de grandes chances de rencontrer la région S (lieu où le contrôle explose, *i.e.* devient infini), on s'intéressera à la géométrie de celle-ci. On pourra de même chercher où D et D' s'annulent pour avoir une vue plus complète du comportement de $u = -D'/D$. On calculera de plus pour chaque trajectoire singulière le premier temps conjugué s'il existe, afin de vérifier l'optimalité locale de la trajectoire. Enfin, on se restreint aux extrémales singulières issues d'un premier arc bang. Autrement dit, on s'intéresse aux trajectoires seulement Bang-Singulières. La durée de l'arc bang détermine de manière unique la trajectoire singulière. En effet, pour $q_0 \in \mathbb{R}^4$ fixé, il existe un unique vecteur adjoint p_0 , au signe près, vérifiant $H_F = H_G = \{H_G, H_F\} = 0$ et $|p_0| = 1$ (*cf.* l'homogénéité de u par rapport à p_0). On prend p_0 tel que sa première composante soit positive. La trajectoire singulière exceptionnelle résultante, est la projection sur l'espace d'état de la solution sur le cotangent des équations (3.5) avec comme point initial $z(0) = (q_0, p_0)$.

Le point q_0 est choisi comme le point final de l'arc bang, et puisque le contrôle bang est choisi, positif, *i.e.* $u = 2\pi$, q_0 est donc déterminé de manière unique par la durée de celui-ci.

On s'intéresse tout d'abord aux trajectoires dont le contrôle explose. On note t_b la durée de l'arc bang. On se restreint à $t_b \in]0, 1]$, ce qui revient à ne pas faire plus d'un tour du disque de Bloch. La normalisation du contrôle à 2π implique que le tour se fait approximativement en une unité de temps avec un contrôle bang. Cela serait exactement une unité de temps si le problème était sans dérive. On représente tout d'abord une trajectoire dont le contrôle explose, *cf.* Fig. A.1. Le temps t_b vaut 0.15. Sur cette figure, on peut voir les trajectoires des spins 1 et 2 projetées respectivement sur les plans (y_1, z_1) et (y_2, z_2) . Le contrôle est aussi donné sur la sous-figure de droite. On peut voir qu'il part à l'infini très brusquement, aux alentours d'un temps de 5.8, où seul le temps de la singulière est compté.

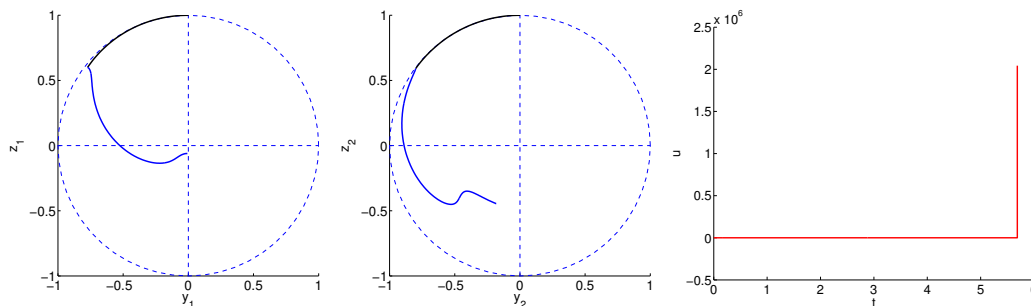


FIGURE A.1 – **Cas du sang** ($H = 0$). Projection sur les plans (y_1, z_1) et (y_2, z_2) des trajectoires des spins 1 et 2 pour $t_b = 0.15$, et le contrôle associé. L'arc bang est représenté en noir, l'arc singulier en bleu. L'explosion du contrôle a lieu en $q_e = (-0.0073, -0.0607, -0.1821, -0.4452)$.

Détaillons ce qu'il se passe au point $q_e = (-0.0073, -0.0607, -0.1821, -0.4452)$, où le contrôle explose. Pour cela, on fixe tout d'abord $q_{e,1}$ dans le plan (y_1, z_1) à la valeur trouvée, *i.e.* $q_{e,1} = (-0.0073, -0.0607)$. Ensuite, on calcule pour $q_2 \in \mathbb{R}^2$ dans tout le disque de Bloch (*i.e.* $|q_2| \leq 1$), les valeurs de $D'(q)$, $D(q)$ et $u(q) = -D'(q)/D(q)$, avec $q = (q_{e,1}, q_2)$, *cf.* Fig. A.2. Cette figure se décompose en trois sous-figures. Celle de gauche représente l'ensemble $\{|D'(q)|, q = (q_{e,1}, q_2), |q_2| \leq 1\}$. Ce n'est pas tout à fait la valeur de $|D'|$, en effet, les petites valeurs de $|D'|$ sont amplifiées afin de bien distinguer les régions où $|D'|$ est presque nul. Les régions les plus sombres étant celles où les valeurs sont les plus basses. La même chose est faite pour D dans la sous-figure du centre. De ces deux sous-figures, se dégagent nettement des régions noires, de forme parabolique, ou hyperbolique, là où les valeurs sont les plus basses. Ceci se retrouve sur la sous-figure de droite qui représente le contrôle u . Sur cette sous-figure, le contrôle est donné sur trois plages de couleurs. La région blanche correspond au lieu où le contrôle est

admissible, *i.e.* $|u| \leq 2\pi$. En noir, on a le lieu où le contrôle est faible, *i.e.* $|u| \leq 1e^{-4}$, et en rouge là où $|u| > 2\pi$. On distingue clairement le lien avec les sous-figures précédentes. La difficulté se trouve là où les points sont à la croisée des régions où $|D'|$ et $|D|$ sont tout deux petits.

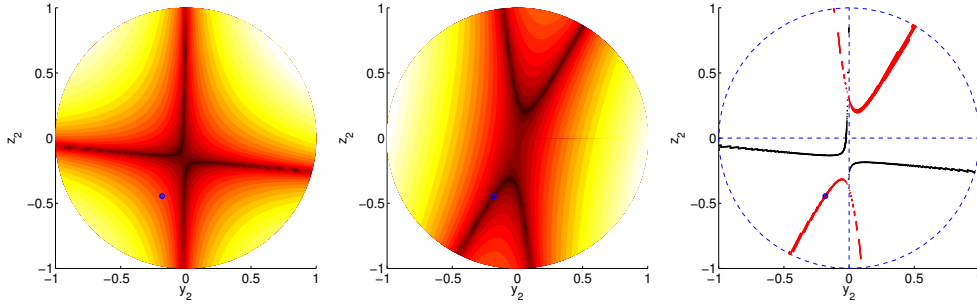


FIGURE A.2 – **Cas du sang** ($H = 0$). Suite à la simulation Fig. A.1, on fixe $q_{e,1} = (-0.0073, -0.0607)$. Sur chaque sous-figure, le cercle bleu est $q_{e,2} = (-0.1821, -0.4452)$. Sur la sous-figure de gauche, est représenté sur une échelle de couleurs, les valeurs de $|D'(q)|^{1/5}$, pour $q = (q_{e,1}, q_2)$ avec $|q_2| \leq 1$. Le paramètre ici est q_2 et les valeurs sont donc représentées dans le plan (y_2, z_2) . Plus la couleur est sombre, plus les valeurs sont faibles. Au centre, on a la même chose pour $|D|$. Enfin à droite, le contrôle u est donné sur trois plages de couleurs. En blanc, on trouve le lieu où le contrôle est admissible, *i.e.* $|u| \in [0, 2\pi]$, en noir, le lieu où u est presque nul, et en rouge là où $|u| > 2\pi$.

Ceci est un exemple d'une singulière dont le contrôle explose. Dans le cas du sang, il existe certaines plages de valeurs de t_b pour lesquelles, le contrôle reste admissible tout au long de la trajectoire. Pour $t_b \leq 1$, si $t_b \in [0.36, 0.42]$ ou $t_b \in [0.59, 0.66]$, alors la trajectoire singulière exceptionnelle associée, est telle que son contrôle reste admissible tout au long de la trajectoire. Les intervalles donnés sont grossiers mais il n'est pas important pour la suite de les avoir de manière précise. Il est à noter que l'on retrouve encore là une conséquence de la symétrie par rapport à l'axe z . En effet, si l'on note (ρ, θ) les coordonnées polaires suivantes : $\rho = \sqrt{y_1^2 + z_1^2}$, $y_1 = \rho \cos \theta$, $z_1 = \rho \sin \theta$, il vient alors que les deux intervalles sont $\theta \in [(1 + 0.2)\pi, (1 + 0.33)\pi]$ et $\theta \in [(2 - 0.33)\pi, (2 - 0.2)\pi]$. Cela n'est toutefois vrai que pour $t_b \leq 1$. Si l'on prend $t_b = 1.4$, alors $\theta = 1.28\pi$ et la trajectoire singulière a un contrôle qui explose. Un exemple de trajectoire pour laquelle le contrôle reste admissible est donné Fig. A.3. Sur cette figure, on retrouve les trajectoires des spins 1 et 2, et le contrôle u , pour $t_b = 0.4$ et $t_s = 150$, avec t_s la durée de l'arc singulier. On peut voir que le contrôle reste admissible, et l'on note que le pôle nord semble être attractif, en plus d'être un point d'équilibre de la trajectoire non contrôlée. Ceci semble se vérifier pour l'ensemble des trajectoires singulières dont le contrôle n'explose pas. Enfin, sur la figure A.3, on retrouve marqué d'un point rouge, le premier point conjugué, à partir duquel la trajectoire n'est plus optimale même localement.

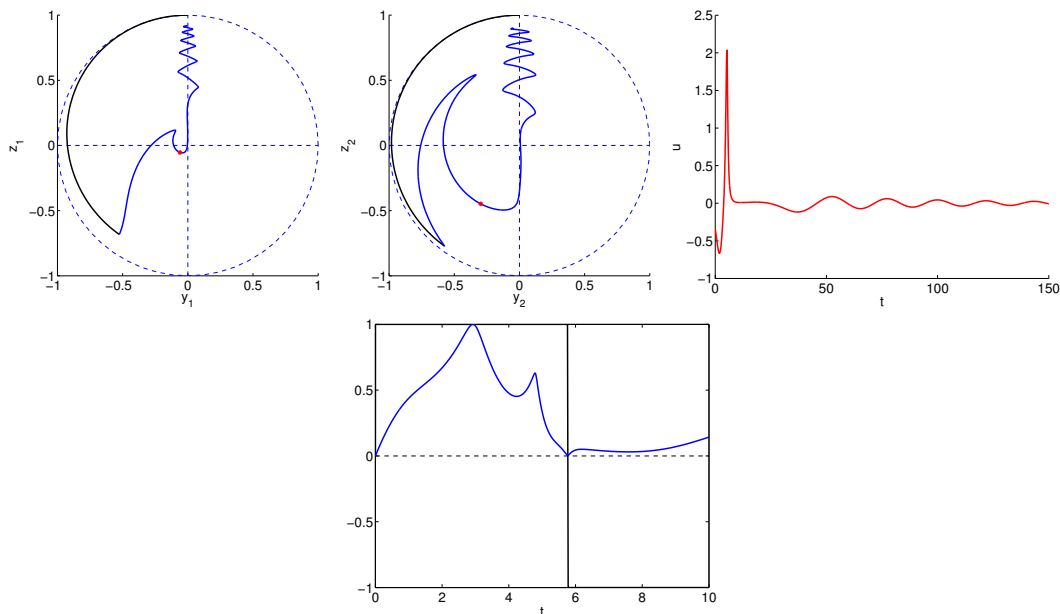


FIGURE A.3 – **Cas du sang** ($H = 0$). Projection sur les plans (y_1, z_1) et (y_2, z_2) des trajectoires des spins 1 et 2 pour $t_b = 0.4$, $t_s = 150$, et le contrôle associé. L’arc bang est représenté en noir, l’arc singulier en bleu. Sur la sous-figure du bas, on retrouve en bleu, la plus petite valeur singulière ainsi qu’en noir, le signe du déterminant, des deux matrices dépendant du temps, utilisées dans le calcul des temps conjugués (cf. Eqs. (3.8) et (3.9)). Le calcul est effectué le long de l’extrémale singulière et on trouve une chute de rang (ou changement de signe du déterminant) en $t_c = 0.4 + 5.758$. Le point conjugué associé $q(t_c)$ est marqué d’un point rouge sur les deux premières sous-figures.

On peut se demander maintenant, quelle est l’évolution le long de cette trajectoire, des lieux significatifs où le contrôle est admissible, faible, ou bien trop grand, en valeur absolue (cf. Fig. A.2). Le long de la trajectoire singulière dont le contrôle reste admissible, on se fixe 12 temps t_i , $i = 1, \dots, 12$, croissants, et on regarde la projection sur le plan (y_2, z_2) , du contrôle u pour q_1 fixé à $q_1 = q_1(t_i) \in \mathbb{R}^2$. Ceci nous donne 12 sous-figures regroupées Fig. A.4, qui se regardent d’abord de gauche à droite, puis de haut en bas. On retrouve d’un cercle bleu, $q_2(t_i)$ et d’un cercle vert $q_1(t_i)$. Les points en noir sont ceux où le contrôle est faible, en valeur absolue, en rouge, les points où le contrôle n’est pas admissible et donc on trouve en blanc, le lieu où u est admissible. De plus, en magenta sont marqués les points où le contrôle explose. On remarque des formes elliptique, parabolique et hyperbolique pour les différents lieux. Si l’on regarde seulement le lieu où u n’est pas admissible (en rouge), alors on voit les déformations progressives. Sur les trois premières sous-figures, ce lieu a plus ou moins une forme elliptique. Il se

rapproche de la frontière à droite, sur la sous-figure 4, pour ensuite se décomposer en deux parties sur les sous-figures 5 à 8. On notera que l'on peut rapprocher la sous-figure 6 à celle présente en Fig. A.2. Les deux parties se rapprochent sur les sous-figures 7 et 8 pour de nouveau former une ellipse en 9. Enfin, on voit comment le spin 2 est capturé dans le lieu où le contrôle explose sur les sous-figures 10 à 12.

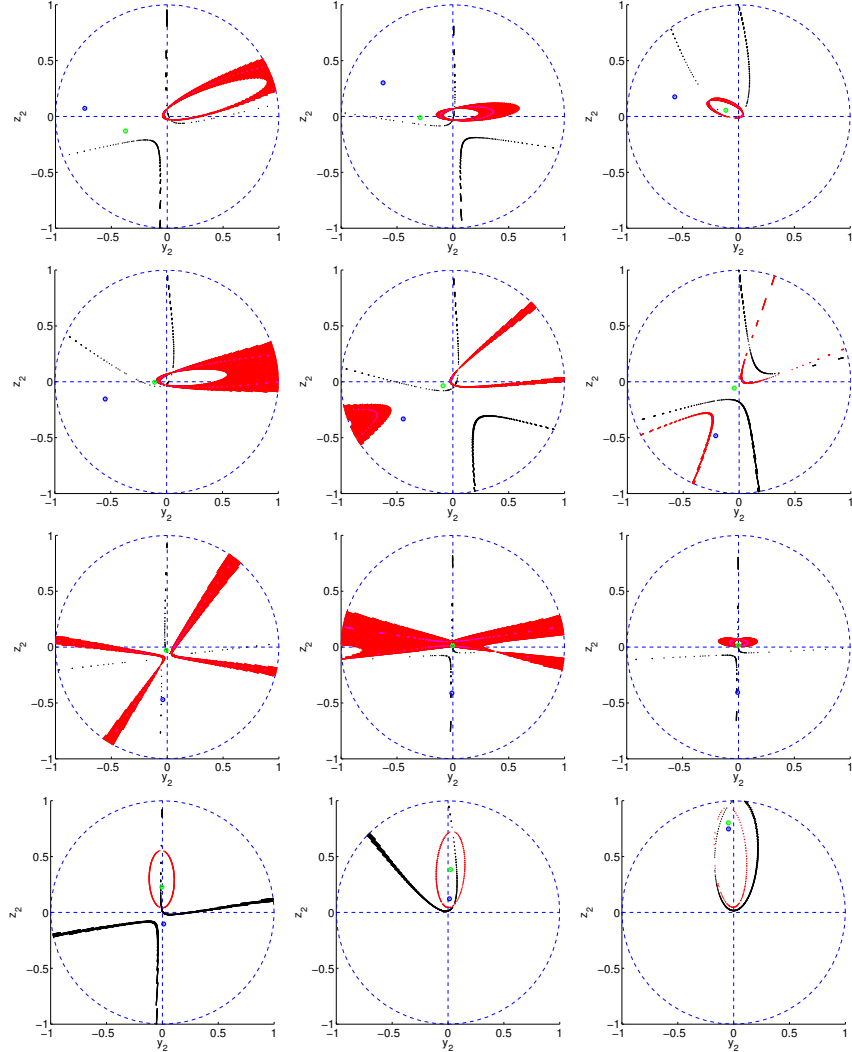


FIGURE A.4 – **Cas du sang** ($H = 0$). Sur chaque sous-figure, le contrôle u est donné sur trois plage de couleurs. En blanc, on trouve le lieu où le contrôle est admissible, *i.e.* $|u| \in [0, 2\pi]$, en noir, le lieu où u est presque nul, et en rouge là où $|u| > 2\pi$. Les sous-figures sont données pour différents instants le long de la trajectoire Fig. A.3. Le temps est croissant si on lit d'abord de gauche à droite, puis de haut en bas. La position du spin 1 est marquée par le cercle vert tandis que celle du spin 2 par le cercle bleu.

Finalement, il est possible de trouver parmi l'ensemble des trajectoires dont le contrôle reste admissible, une trajectoire dont le premier spin passe par $(0, 0)$. En effet, pour $t_b = 0.3858$, $t_s = 8.5224$, on a $q_1(t_f) = (0, 0)$, où $t_f := t_b + t_s$. On rappelle que le coût du problème de contraste est la distance au carré du spin 2 par rapport à l'origine, au temps final. Le contraste est alors défini comme la distance à l'origine. Pour cette trajectoire, on obtient un contraste de 0.4272. Les conditions de transversalité sont $p_2(t_f) = -2p^0 q_2(t_f)$, $p^0 \leq 0$. Elles sont ici vérifiées avec $p^0 = -4.3843$. Cependant, on remarque qu'il existe un temps conjugué avant t_f , cette solution n'est donc pas optimale, même localement, cf. Fig. A.5.

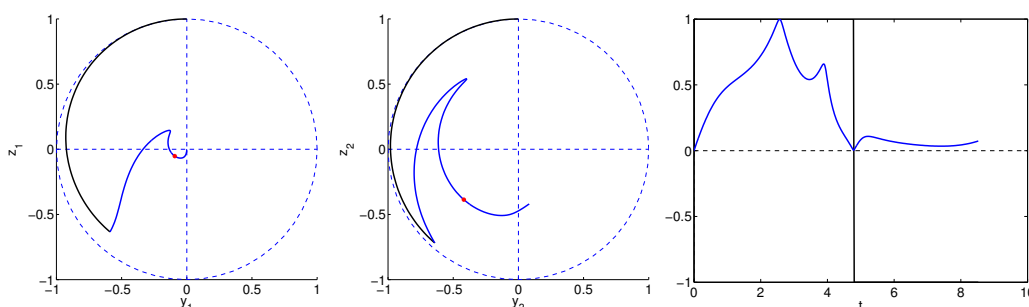


FIGURE A.5 – **Cas du sang** ($H = 0$). Projection sur les plans (y_1, z_1) et (y_2, z_2) des trajectoires des spins 1 et 2 pour $t_b = 0.3858$, $t_s = 8.5224$. L'arc bang est représenté en noir, l'arc singulier en bleu. Sur la sous-figure de droite, on retrouve en bleu, la plus petite valeur singulière ainsi qu'en noir, le signe du déterminant, des deux matrices dépendant du temps, utilisées dans le calcul des temps conjugués (cf. Eqs. (3.8) et (3.9)). Le calcul est effectué le long de l'extrémale singulière et on trouve une chute de rang (ou changement de signe du déterminant) en $t_c = t_b + 4.7861$. Le point conjugué associé $q(t_c)$ est marqué d'un point rouge sur les deux premières sous-figures.

Cas exceptionnel. b) Cas du liquide cérébrospinal et de l'eau. Nous allons dans ce paragraphe, voir comment se comporte le flot singulier exceptionnel, dans le cas du liquide cérébrospinal et de l'eau (voir Table 3.1 pour la valeur des temps de relaxation). Ce cas est appelé plus brièvement, le cas du fluide. On retrouve des phénomènes similaires au cas du sang et d'autres différents. Les intervalles où les trajectoires singulières ont un contrôle qui reste admissible sont ici $t_b \in]0, 0.31]$ et $t_b \in [0.69, 1[$ qui correspondent en coordonnées polaires à $\theta \in]0, (1 + 0.12)\pi]$ et $\theta \in [(2 - 0.12)\pi, 2\pi[$. On montre deux exemples, un où le contrôle explose et un autre où le contrôle reste admissible en Figs. A.6 et A.7. Comme pour le cas du sang, le contrôle part à l'infini brusquement. Le pôle nord semble toujours être un point attractif, même si la trajectoire singulière oscille moins autour de l'axe z dans le cas du fluide. Enfin, la plus grande différence vient de la difficulté à trouver une solution vérifiant les conditions de

transversalité. Il ne semble pas y avoir beaucoup de solutions Bang-Singulières exceptionnelles au problème de contraste dans le cas du fluide. Aucune n'ayant été trouvée ici. Cependant, ceci n'est pas critique puisque dans les sections suivantes, nous verrons qu'à partir d'une régularisation du problème, puis en utilisant les méthodes homotopique et de tir, il est possible de trouver des solutions bien plus complexes que seulement Bang-Singulières.

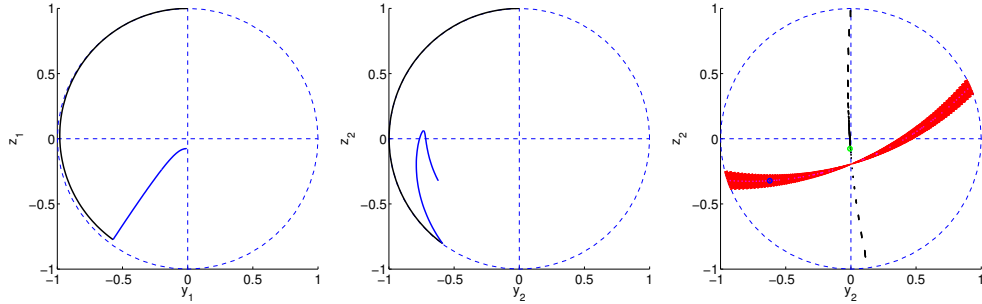


FIGURE A.6 – **Cas du fluide** ($H = 0$). Projection sur les plans (y_1, z_1) et (y_2, z_2) des trajectoires des spins 1 et 2 pour $t_b = 0.4$, et le contrôle associé. L'arc bang est en noir, l'arc singulier en bleu. L'explosion du contrôle a lieu en $q_e = (-0.0071, -0.0762, -0.6220, -0.3219)$.

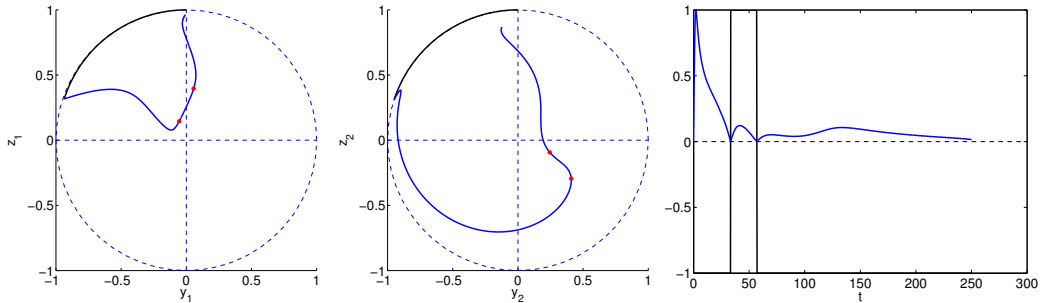


FIGURE A.7 – **Cas du fluide** ($H = 0$). Projection sur les plans (y_1, z_1) et (y_2, z_2) des trajectoires des spins 1 et 2 pour $t_b = 0.2$, $t_s = 250$. L'arc bang est en noir, l'arc singulier en bleu. Sur la sous-figure de droite, on retrouve en bleu, la plus petite valeur singulière ainsi qu'en noir, le signe du déterminant, des deux matrices dépendant du temps, utilisées dans le calcul des temps conjugués (*cf.* Eqs. (3.8) et (3.9)). Le calcul est effectué le long de l'extrémale singulière et on trouve deux chutes de rang (ou changement de signe du déterminant). Les deux points conjugués sont marqués d'un point rouge sur les deux premières sous-figures.

Cas non exceptionnel Dans ce paragraphe, on s'intéresse au flot singulier issu d'un arc bang, dans le cas non exceptionnel. La contrainte $H = 0$ est donc relaxée. Dans les deux derniers paragraphes, le paramètre t_b déterminait de manière unique la trajectoire singulière. Ici, la valeur de l'Hamiltonien devient un deuxième paramètre, puisque H est une intégrale première pour un problème autonome. Les trajectoires singulières sont donc déterminées à partir de (t_b, \bar{h}) , où $0 < t_b \leq 1$ est la durée de l'arc bang, et $\bar{h} \in \mathbb{R}$ la valeur de l'Hamiltonien constant le long de la trajectoire. Ainsi, pour $q \in \mathbb{R}^4$ fixé, il existe une nappe de trajectoires singulières et non plus une simple trajectoire. De plus, la condition de Legendre généralisée, $\{\{H_G, H_F\}, H_G\} \geq 0$, réduit l'ensemble des valeurs possibles de H à une demi-droite. On peut voir un exemple de nappes singulières pour \bar{h} positif Fig. A.8 et \bar{h} négatif Fig. A.9, pour $t_b = 0.2$. Les trajectoires pour $\bar{h} \geq -0.04$ vérifient la condition de Legendre généralisée.

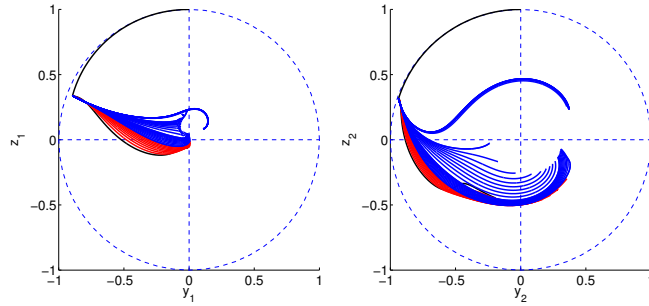


FIGURE A.8 – **Cas du sang** ($H \in \mathbb{R}$). Projection sur les plans (y_1, z_1) et (y_2, z_2) des trajectoires des spins 1 et 2 pour $t_b = 0.2$, $t_s = 9$ et $\bar{h} \in [0, 100]$. L'arc bang et l'arc singulier exceptionnel figurent en noir, les trajectoires singulières dont le contrôle a explosé sont en rouge, les autres en bleu.

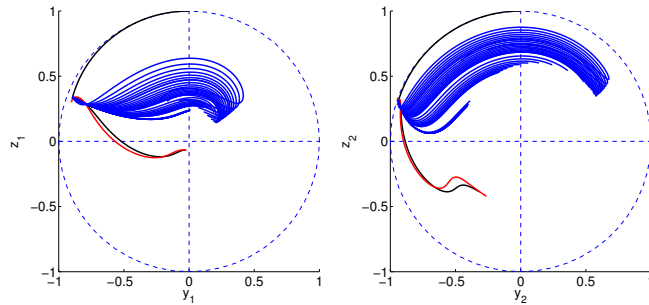


FIGURE A.9 – **Cas du sang** ($H \in \mathbb{R}$). Projection sur les plans (y_1, z_1) et (y_2, z_2) des trajectoires des spins 1 et 2 pour $t_b = 0.2$, $t_s = 5$ et $\bar{h} \in [-100, 0]$. Voir Fig. A.8 pour les couleurs.

En fixant différentes valeurs de t_b et en prenant t_s , la durée des arcs singuliers, suffisamment grand, il est possible de faire une première approximation des trajectoires Bang-Singulières dont le premier spin passe par le centre du disque de Bloch. Par exemple, pour $t_b = 0.2$ et $\bar{h} \in [0, 100]$, on voit clairement que la nappe singulière passe par $(0, 0)$ pour le premier spin. Il revient alors à chercher quelle est celle qui effectivement passe au plus près du centre et pour quelles valeurs de \bar{h} et t_s . On récapitule Table A.1 les différentes valeurs de t_b choisies et pour chacune on indique pour quel intervalle de \bar{h} , il semble possible d'avoir une solution passant par le centre. On se limite toujours à ne pas faire plus d'un tour du disque, *i.e.* $t_b \leq 1$.

t_b	0.2	0.4	0.6	0.65	0.8	0.9
\bar{h}	[0, 2]	[-0.1, 2]	[0.05, 0.1]	[-0.5, 0]	[-0.5, 0]	[-0.1, 0]
Région	NO	SO	SE	SE	NE	NE

TABLE A.1 – Tableau regroupant les différents choix de t_b et les intervalles de valeurs de \bar{h} permettant au premier spin d'arriver en $(0, 0)$. La durée maximale de l'arc singulier a été choisie à $2T_{min}$ (*cf.* Table 3.2). On donne en indication, la région dans le disque de Bloch associée à chaque t_b , prenant les valeurs Sud-Ouest (SO), Sud-Est (SE), Nord-Est (NE) et Nord-Ouest (NO).

Formalisons le problème de recherche de solutions Bang-Singulières respectant les conditions de transversalité. Nous avons déjà t_b , la durée de l'arc bang et \bar{h} la valeur de l'Hamiltonien. Partant de $q(0) = N = ((0, 1), (0, 1))$, on note $q_b := q(t_b)$ l'état en t_b issu de l'arc bang, indépendant du choix de $p(0)$. On note $p_b := p(t_b)$ déterminé de manière unique par $H_G(z_b) = dH_G(z_b) = 0$, $H(z_b) = H_F(z_b) = \bar{h}$, $p_{b,y_1} = 1$ et $|p_b| = 1$, avec $z_b := (q_b, p_b)$. La première composante de p_b est fixée à 1 afin de casser l'homogénéité du contrôle en p . On choisit p_b unitaire pour normaliser le vecteur adjoint. De manière duale, on n'aurait pu fixer la valeur de H et choisir comme paramètre, la position sur la droite affine solution de $H_G(z_b) = dH_G(z_b) = 0$ et $H(z_b) = h$, h fixé. Ensuite, on note $z_f := z(t_s, z_b)$ la solution de $\dot{z} = \vec{H}_s(z)$, telle que $z(0) = z_b$ et telle que $t_s := \arg \min_{t>0} \{|q_1(t)|^2\}$, $z(t) = (q_1, q_2, p_1, p_2)(t) = z(t, z_b)$. Enfin si l'on pose

$$S : \mathbb{R}^{*+} \times \mathbb{R} \times \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}$$

$$(t_b, \bar{h}, t_s) \longmapsto S(t_b, \bar{h}, t_s) = (q_1(t_s), \det(q_2(t_s), p_2(t_s))),$$

trouver une solution Bang-Singulière au problème de contraste revient à trouver un zéro de la fonction S . On rappelle que la condition de transversalité sur l'adjoint est $p_2(t_s) = -2p^0 q_2(t_s)$, $p^0 \in \mathbb{R}$. L'homogénéité a été cassée en fixant la norme du vecteur adjoint à $|p_b| = 1$, p^0 reste donc libre et la condition est simplement que q_2 et p_2 soient colinéaires. Pour résoudre ce problème, on utilise la Table A.1 pour délimiter six zones de recherche, puis dans chacune d'entre elles, on cherche de manière naive, les solutions telles que $|S| < \varepsilon$, $\varepsilon > 0$ suffisamment petit. Enfin, parmi l'ensemble des solutions

112 Annexe A. Résultats supplémentaires pour le problème de contraste

vérifiant $|S| < \varepsilon$, on retiendra celle qui possède le meilleur contraste. Les six zones sont explicitées Table A.2.

nom	t_b	\bar{h}	t_s	Région
Z1	[0.01, 0.49]	[0.00, 2.00]	$]0, 2T_{min}]$	NO-SO
Z2	[0.57, 0.63]	[0.01, 0.20]	$]0, 2T_{min}]$	SE
Z3	[0.62, 0.68]	$[-0.5, 0.00]$	$]0, 2T_{min}]$	SE
Z4	[0.76, 0.84]	$[-0.5, 0.00]$	$]0, 2T_{min}]$	NE
Z5	[0.86, 0.94]	$[-0.2, 0.00]$	$]0, 2T_{min}]$	NE
Z6	[0.35, 0.45]	$[-0.2, 0.00]$	$]0, 2T_{min}]$	SO

TABLE A.2 – Les six zones de recherche.

Pour la zone Z1, les deux intervalles sur t_b et \bar{h} sont discrétisés à 500 pas. Pour les autres zones plus petites, seulement 200 pas sont utilisés. Pour trouver $t_s \in]0, 2T_{min}]$, on laisse l'intégrateur à pas variable choisir la discrétisation. On fixe seulement les tolérances afin d'avoir des pas suffisamment petits. On donne Table A.3, les résultats concernant la meilleure solution Bang-Singulière obtenue, pour chaque zone, pour le problème de contraste, dans le cas du sang, avec ε fixé à 5.10^{-4} . On donne la valeur du premier instant conjugué normalisé t_c s'il existe, qui doit donc être inférieur à 1 pour assurer l'optimalité locale. Le rapport entre $t_f := t_b + t_s$ et T_{min} est aussi indiqué.

zone	contraste	$2p^0$	\bar{h}	t_b	t_s	t_c	t_f/T_{min}
Z1	0.4661	-3.7102	0.0241	0.0389	8.9621	0	1.3240
Z2	0.4321	3.9415	0.0721	0.6020	8.3864	0.5131	1.3222
Z3	0.4269	4.3032	0	0.6269	8.4116	0.4681	1.3295
Z4	0.4372	3.7456	-0.1206	0.8387	6.8054	0.9698	1.1244
Z5	0.4497	3.6041	-0.0321	0.9347	7.8435	0	1.2912
Z6	0.4328	-4.0067	-0.0723	0.4062	8.5216	0.5280	1.3133

TABLE A.3 – Pour chaque zone sont donnée les paramètres significatifs de la meilleure solution obtenue par la discrétisation. La condition de Legendre généralisée : $\{\{H_G, H_F\}, H_G\} \geq 0$ est vérifiée pour chacune des solutions.

Au vu des résultats de la Table A.3, le contraste varie entre 0.4269 et 0.4661. Les trois contrastes les plus bas sont pour les zones Z2, Z3 et Z6, situées toutes trois dans l'hémisphère sud. Le meilleur contraste est obtenu pour la zone Z1 dans le quart Nord-Ouest, pour un arc bang très court. Cependant, de manière opposée, un arc bang très long permet d'obtenir un bon contraste, cf. résultat zone Z5. D'ailleurs, les solutions de Z1 et Z5 sont les seules à ne pas avoir de point conjugué. En effet, les quatre autres solutions en possède un avant le point final et ne sont donc pas optimales. Les niveaux de l'Hamiltonien se situent entre -0.1206 et 0.0721 , ils sont donc relativement bas. On

pourrait donc affiner la recherche dans tous le disque, *i.e.* $0 < t_b < 1$, en restreignant $\bar{h} \in [-0.15, 0.15]$. Ceci a été fait pour de plus $t_b \in]0, 3[$ mais cela n'apporte pas d'amélioration. Il existe aussi une extrémale exceptionnelle, en Z3. Enfin, on remarque que toutes les solutions sauf celles en Z4, ont un temps final t_f proche de 1.3 fois le temps minimal.

La solution en Z1 est présentée Fig. A.10, puis la solution en Z2 Fig. A.11. On remarque que la solution en Z2 n'est pas admissible, elle est donc à rejeter. C'est la seule dans ce cas. La solution en Z5 est de même nature que celle en Z1, à cause de la symétrie de révolution autour de l'axe z . Le contraste est plus bas à cause de la dérive qui fait rentrer la solution vers l'intérieur du cercle, en dehors du lieu de colinéarité.

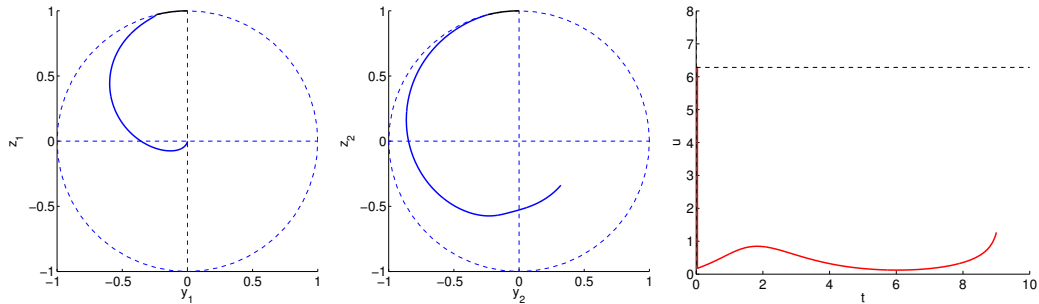


FIGURE A.10 – **Cas du sang** ($H \in \mathbb{R}$). Projection sur les plans (y_1, z_1) et (y_2, z_2) des trajectoires des spins 1 et 2 pour la meilleure solution obtenue en Z1, *cf.* Table A.3. Le contrôle Bang-Singulier est situé sur la sous-figure de droite.

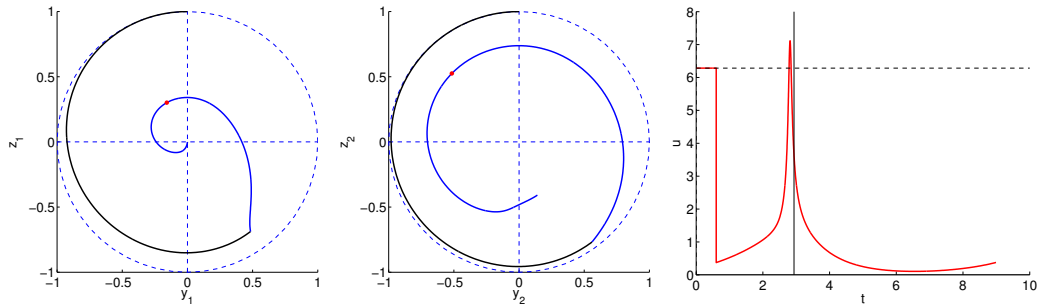


FIGURE A.11 – **Cas du sang** ($H \in \mathbb{R}$). Projection sur les plans (y_1, z_1) et (y_2, z_2) des trajectoires des spins 1 et 2 pour la meilleure solution obtenue en Z1, *cf.* Table A.3. Le contrôle Bang-Singulier est situé sur la sous-figure de droite. On remarque que la singulière n'est pas admissible et qu'un point conjugué survient sur la singulière (marqué d'un axe vertical sur le contrôle et d'un point rouge sur les trajectoires). Peut-être qu'une structure avec un arc bang supplémentaire conviendrait.

On peut voir l'aspect très irrégulier de la fonction $|S|$ sur Z1 Fig. A.12, en deux et trois dimensions. De cette figure se dégage plusieurs courbes distinctes où $|S|$ est proche de zéro. Le contraste associé aux solutions telles que $|S| < 5.10^{-4}$, ainsi que les points conjugués trouvés, sont regroupés Fig. A.13. Sur la figure du contraste, on aperçoit trois régions différentes dont deux sont à rejeter. La meilleure solution obtenue est donc pour $t_f/T_{min} = 1.3240$ avec un contraste de 0.4661. Cette solution a un arc bang de durée 0.0389 et l'Hamiltonien vaut 0.0241. Ce point se situe dans le coin inférieur gauche de la sous-figure de droite Fig. A.12. En raffinant dans un voisinage de cette région, on peut trouver la meilleure solution Bang-Singulière qui semble se rapprocher d'une solution telle que l'arc bang soit de durée la plus faible possible. En effet, en cherchant dans $t_b \in [0.001, 0.015]$ et $\bar{h} \in [0, 0.03]$, on trouve une solution encore meilleure avec un contraste de 0.4667 pour $t_b = 0.0138$, $\bar{h} = 0.0086$ et $t_f = 1.4474T_{min}$.

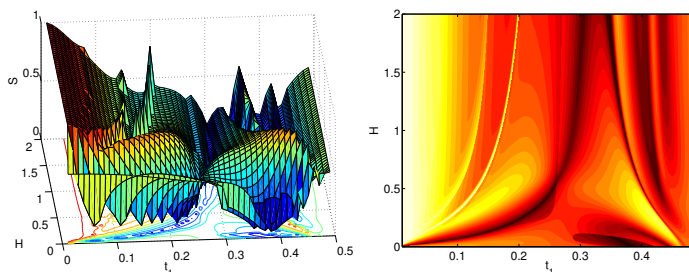


FIGURE A.12 – **Cas du sang** ($H \in \mathbb{R}$). Graphe de $|S|$ sur la région Z1 (cf. Table A.2), en trois dimensions à gauche et deux dimensions à droite. Sur la sous-figure de droite, plus la valeur de $|S|$ est basse, plus la couleur est sombre. La sous-figure de gauche affiche $|S|^{1/2}$ afin d'accentuer les petites valeurs.

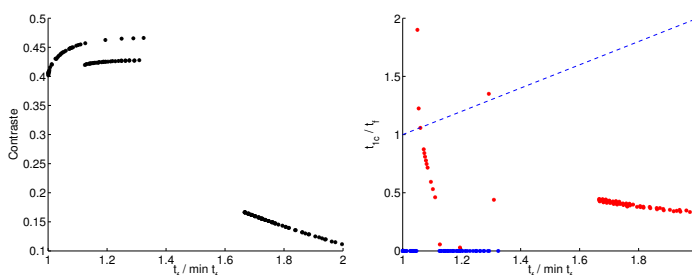


FIGURE A.13 – **Cas du sang** ($H \in \mathbb{R}$). Contraste et temps conjugués normalisés pour les solutions en Z1 telles que $|S| < 5.10^{-4}$. En abscisse, on a le temps final t_f normalisé par le temps minimal pour transférer le spin 1 en $(0, 0)$. En ordonné, sur la sous-figure de droite, le temps conjugué est normalisé par le temps final. Ainsi, la trajectoire n'est pas optimale si le temps conjugué arrive avant 1, matérialisé par la droite $y = x$ en tirets bleu. Les points bleu en $y = 0$ sont là pour marquer les trajectoires n'ayant pas de point conjugué.

Finalement, nous reproduisons cette algorithmme multi-grille de recherche de solutions Bang-Singulières pour les 3 autres cas présentés Table 3.1. Le cas du liquide cérébrospinal/eau étant légèrement modifié afin de correspondre aux simulations réalisées Réf. [Lap11]. Le temps T_2 du liquide cérébrospinal est remplacé par la valeur 300 au lieu de 200. Il existe en effet plusieurs possibilités pour ce cas. Dans Réf. [Lap11], l’auteur présente trois différentes solutions. La première est appelée solution d’inversion, notée (*IR*). Elle consiste à faire basculer le premier spin du pôle nord vers le pôle sud par un arc bang, puis appliquer un contrôle nul afin de laisser la dérive amener le premier spin en $(0, 0)$. Le contraste se lit à partir de là sur le second spin. L’autre méthode consiste à utiliser la solution appelée dans la référence pré-citée, solution de *saturation* (*SAT*) qui amène le premier spin en $(0, 0)$ en temps minimal. Enfin, la troisième solution est simplement une solution Bang-Singulière (*BS*) vérifiant les conditions de transversalités du problème de contraste. L’auteur compare cela aux résultats plus anciens obtenus des méthodes utilisées par l’équipe de S. Glaser, à partir du code *Grape*, cf. Réfs. [KRK⁺05, SKL⁺06], qui repose sur des méthodes itératives de type gradient. On regroupe finalement Table A.4, les meilleures solutions ici obtenues avec la meilleure extraite de Réf. [Lap11].

Cas	Contraste (<i>BS</i>)	\bar{h}	t_b	t_s	t_f/T_{min}	Cont. Réf.
1	0.5765	-0.1015	0.7376	25.5801	1.3009	0.5799 (<i>BS</i>)
2	0.4667	0.0241	0.0086	8.9621	1.4474	0.4665 (<i>BS</i>)
3	0.1149	0.1177	0.4990	19.351	2.0046	0.1146 (<i>IR</i>)
4	0.9050	-0.1417	0.7229	3.9976	1.0363	0.9003 (<i>SAT</i>)

TABLE A.4 – Meilleures solutions (pour $\varepsilon = 5.10^{-4}$) obtenues par l’algorithmme multi-grille de recherche de solutions Bang-Singulières, comparées aux meilleures présentées Réf. [Lap11]. Le contraste de ces solutions est donné dans la colonne “Cont. Réf.”. Les différents cas sont redonnés Table A.5.

On remarque en premier lieu que toutes nos extrémales n’ont pas de temps conjugué avant le temps final, elles sont donc localement optimales. Il n’y a pas de grandes différences en terme de contraste entre les solutions trouvées ici et celles de référence puisque une partie de ce travail a été réalisé conjointement avec M. Lapert. Cependant, les techniques géométriques liées au Principe du Maximum de Pontryagin et la découverte de l’importance des extrémales singulières aura permis d’accroître substantiellement le contraste, comparé aux premier résultats. On remarque que les meilleures solutions déjà connues sont obtenues à partir d’une solution Bang-Singulière pour les cas du liquide cérébrospinal/eau et du sang désoxygéné/oxygéné, tandis que dans le cas matière grise/blanche, la meilleure solution est l’inversion et pour le couple graisse/eau, c’est la technique de *saturation* qui l’emporte. Cependant, il faut noter que notre solution Bang-Singulière pour le couple matière grise/blanche possède un arc bang de durée

0.4990 ce qui revient à une inversion. Les deux solutions se rejoignent donc aussi en terme de stratégie. Par contre, celle-ci ne vérifie pas la condition de Legendre généralisée. Enfin, les expériences réalisées montrent que si l'on fixe ε à environ 10^{-3} , alors il existe plusieurs centaines de solutions possibles, pour chacun des cas. La discrétisation 500×500 donnent 250000 candidats. Et dans ces centaines de solutions valides, beaucoup ont des contrastes très proches malgré des stratégies différentes en terme de longueur d'arc bang.

1. Liquide cérebrospinal	: $T_1 = 2000$ ms,	$T_2 = 300$ ms
Eau	: $T_1 = 2500$ ms,	$T_2 = 2500$ ms
2. Sang désoxygéné	: $T_1 = 1350$ ms,	$T_2 = 50$ ms
Sang soxygéné	: $T_1 = 1350$ ms,	$T_2 = 200$ ms
3. Matière grise cérébrale	: $T_1 = 920$ ms,	$T_2 = 100$ ms
Matière blanche cérébrale	: $T_1 = 780$ ms,	$T_2 = 90$ ms
4. Eau	: $T_1 = 2500$ ms,	$T_2 = 2500$ ms
Gras	: $T_1 = 200$ ms,	$T_2 = 100$ ms

TABLE A.5 – Temps de relaxation présentés en Table 3.1 où T_2 pour le liquide cérebrospinal est remplacé par la valeur 300, au lieu de 200.

Synthèse

Le principe du Maximum de Pontryagin nous a permis de découvrir l'importance des trajectoires singulières dans le problème de contraste. Ces trajectoires jouant déjà un rôle fondamental pour le problème temps minimal à un seul spin. En couplant ces méthodes géométriques, à un premier algorithme naïf, il a été possible de trouver des solutions Bang-Singulières respectant à 10^{-4} près les conditions de transversalités. Pour cela, il aura fallu réduire la zone de recherche à discrétiser, afin d'obtenir de bons résultats. En effet, le caractère très irrégulier de la fonction $|S|$ demande une bonne discrétisation. Cet algorithme pourrait être amélioré en raffinant la grille de recherche de manière automatique sur plusieurs pas, les calculs en chaque point de la grille pourraient être parallélisés afin de gagner en temps de calcul, et permettre pourquoi pas d'augmenter le nombre de variables pour rechercher des solutions de type *BSBS*, possédant donc deux séquences Bang-Singulières et deux inconnues de plus. Cependant, cet algorithme n'est pas déterminant dans ce manuscrit pour plusieurs raisons. Bien qu'il est un caractère pseudo-global, il ne permet pas facilement d'expliquer les différentes stratégies en fonction des paramètres, que sont les temps de relaxation et le temps final. Il sera plus facile par la continuation différentielle, de comprendre les déformations dépendant des paramètres. De plus, on pourra par des techniques de régularisation, capturer la structure optimale pour un jeu de données particulier. La section 3.4 détaille la méthode de régularisation choisie ainsi que les résultats que l'on

peut en tirer. Enfin, les sections qui suivent permettent dans le cas du sang et du fluide, tout d'abord de déterminer la stratégie optimale en fonction du temps, mais aussi par la suite, de mieux comprendre les difficultés inhérentes au problème de contraste, dues aux nombreuses symétries qu'il possède.

Solutions tirées des synthèses sous-optimales §3.7

Cette deuxième section de l'annexe regroupe les solutions présentées §3 section 3.7 Figs. 3.33 et 3.34. Les paramètres de relaxation sont donnés Table 3.1.

No.	t_f/T_{min} Contraste	t_i/t_f	$p(0)$	Struct.	Fig.
B_1	1.2941991237 0.4656279572	(0.0055996161)	$\begin{pmatrix} 0.0108259178 \\ -0.0505389010 \\ -0.0109542844 \\ 0.2646216763 \end{pmatrix}$	ξ_+	A.14
B_2	1.2941991237 0.4656279572	$\begin{pmatrix} 0.0112924992 \\ 0.2689662791 \\ 0.3248455927 \\ 0.6649870428 \\ 0.7148737880 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0.0516241940 \\ -0.0372448182 \\ -0.0530004702 \\ 0.2202954614 \end{pmatrix}$	ξ_{+--}	A.14
C	2.0070886238 0.4981748078	$\begin{pmatrix} 0.0013566594 \\ 0.4554299751 \\ 0.4916361828 \\ 0.9133158670 \\ 0.9443056493 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0.0198528374 \\ 0.0194468607 \\ -0.0199384598 \\ 0.1924221362 \end{pmatrix}$	ξ_{+--}	A.15

TABLE A.6 – **Cas du sang.** Solutions en B et C de Fig. 3.33. $T_{min} = 6.7980978868$.

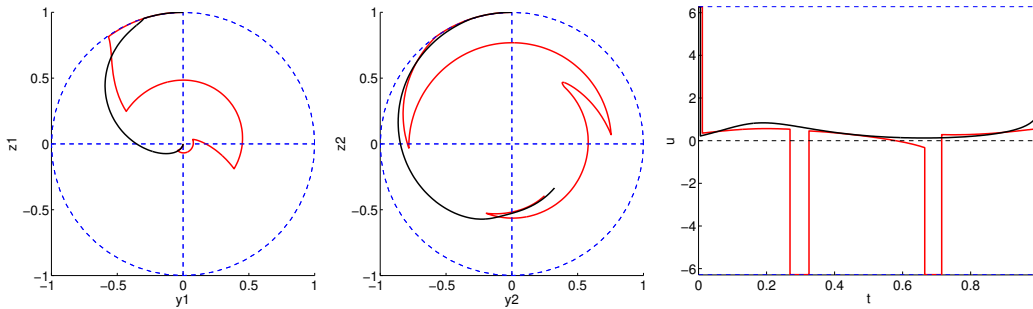


FIGURE A.14 – **Cas du sang.** Solutions B_1 en noir et B_2 en rouge.

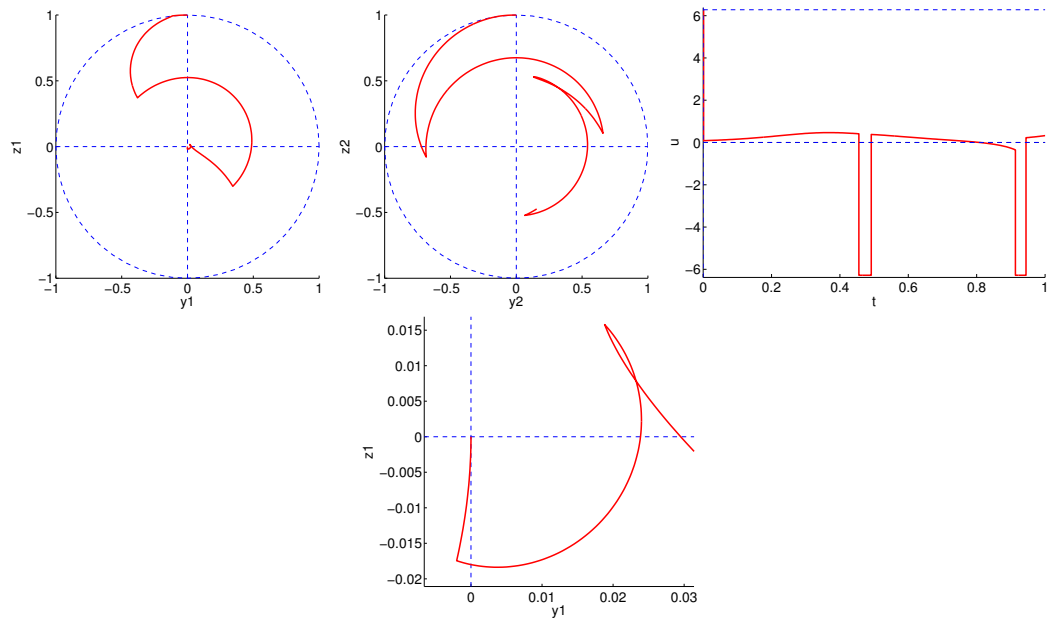


FIGURE A.15 – **Cas du sang.** Solution C avec un zoom en $(0, 0)$ pour le spin 1.

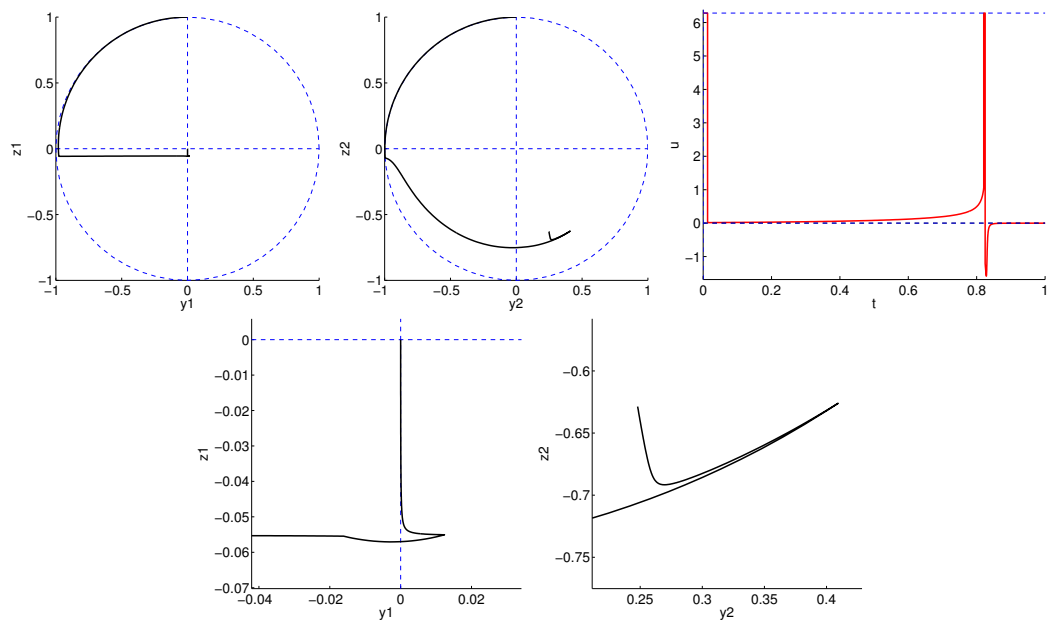


FIGURE A.16 – **Cas du fluide.** Solution A.

No.	t_f/T_{min} Contraste	t_i/t_f	$p(0)$	Struct.	Fig.
A	1.0000033142 0.6758227425	$\begin{pmatrix} 0.0129297698 \\ 0.8207265449 \\ 0.8246925529 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -0.3478764126 \\ -10.3587788522 \\ 0.0923064505 \\ 0.5178908271 \end{pmatrix}$	ξ_{++}	A.16
B	1.0079892848 0.6916766024	$\begin{pmatrix} 0.0130735806 \\ 0.6489900328 \\ 0.6680144185 \\ 0.8603135945 \\ 0.8603838406 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -0.0706848823 \\ -0.2441731551 \\ 0.0657054238 \\ 0.5332845152 \end{pmatrix}$	ξ_{++-}	A.17
D	1.2248626981 0.7580419943	$\begin{pmatrix} 0.0062579447 \\ 0.3532527405 \\ 0.3717347721 \\ 0.9189390790 \\ 0.9194057222 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -0.0409848359 \\ -0.0537715597 \\ 0.0418256756 \\ 0.5561597907 \end{pmatrix}$	ξ_{-++}	A.18
E	1.9999999586 0.7979927479	$\begin{pmatrix} 0.0012015957 \\ 0.5057941430 \\ 0.5170343049 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -0.0221953483 \\ 0.0097089190 \\ 0.0222756765 \\ 0.4829821425 \end{pmatrix}$	ξ_{-+}	A.19

TABLE A.7 – **Cas du fluide.** Solutions A, B, D et E de Fig. 3.34. $T_{min} = 20.2301921162$.

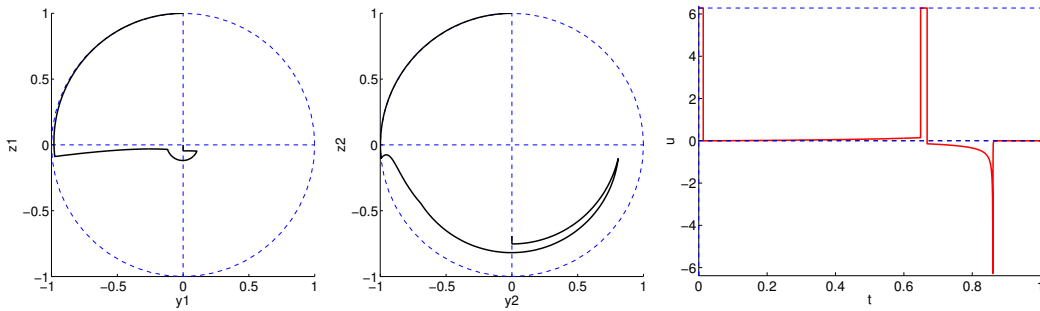


FIGURE A.17 – **Cas du fluide.** Solution B.

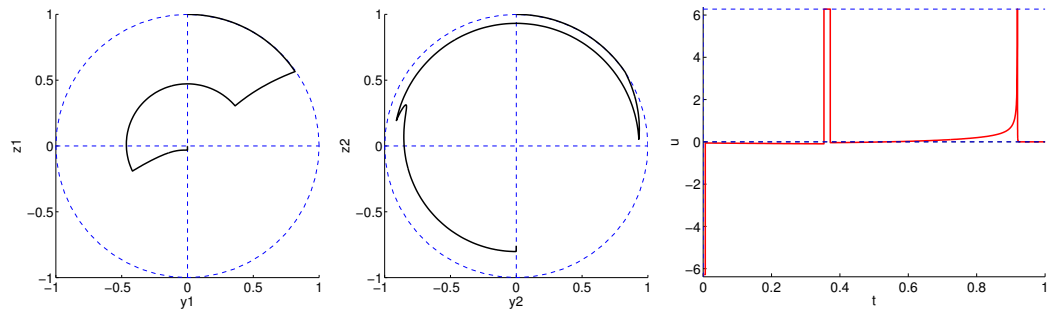


FIGURE A.18 – Cas du fluide. Solution D.

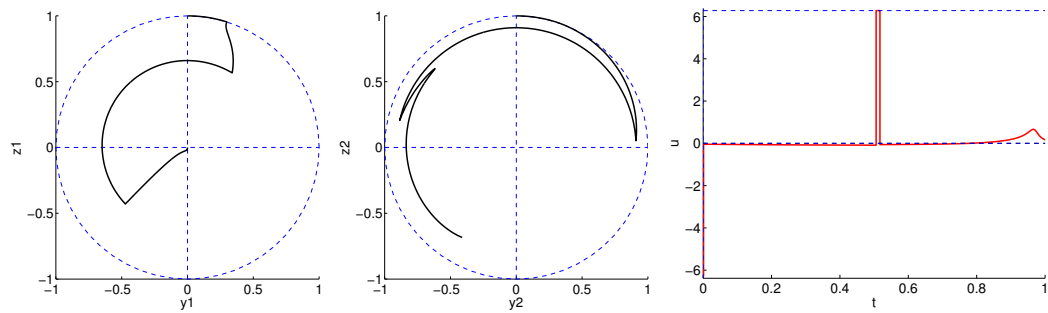


FIGURE A.19 – Cas du fluide. Solution E.

Bibliographie

- [ABB⁺99] E. Anderson, Z. Bai, C. Bischof, S. Blackford, J. Demmel, J. Dongarra, J. D. Croz, A. Greenbaum, S. Hammarling, A. McKenney & D. Sorensen, *LAPACK Users' Guide*, Soc. for Industrial and Applied Math., Philadelphia, PA, USA, third edn. (1999). \leftrightarrow 37.
- [AG03] E. Allgower & K. Georg, *Introduction to numerical continuation methods*, vol. 45 of *Classics in Applied Mathematics*, Soc. for Industrial and Applied Math., Philadelphia, PA, USA, (2003), xxvi+388. \leftrightarrow 20, 22, 36 et 37.
- [AMR95] U. Ascher, R. Mattheij & R. Russell, *Numerical Solution of Boundary Value Problems for Ordinary Differential Equations*, vol. 13 of *Classics in Applied Mathematics*, Soc. for Industrial and Applied Math., Philadelphia, PA, USA, (1995), xxvi+595. \leftrightarrow 25.
- [AS04] A. A. Agrachev & Y. L. Sachkov, *Control theory from the geometric viewpoint*, vol. 87 of *Encyclopaedia of Mathematical Sciences*, Springer-Verlag, Berlin (2004), xiv+412. \leftrightarrow 1 et 7.
- [BBDHM88] M. C. Bartholomew-Biggs, L. C. W. Dixon, S. E. Hersom & Z. A. Maany, *The solution of some difficult problems in low-thrust interplanetary trajectory optimization*, *Optimal Control Appl. Methods*, 9 (1988), no. 3, 229–251. \leftrightarrow 44.
- [BBLV⁺05] N. Bérend, J. F. Bonnans, J. Laurent-Varin, M. Haddou & C. Talbot, *An Interior-Point Approach to Trajectory Optimization*, Rapport de recherche RR-5613, INRIA (2005). \leftrightarrow 46.
- [BC03] B. Bonnard & M. Chyba, *Singular trajectories and their role in control theory*, vol. 40 of *Mathematics & Applications*, Springer-Verlag, Berlin (2003), xvi+357. \leftrightarrow 57 et 60.
- [BC11] B. Bonnard & J.-B. Caillau, *Metrics with equatorial singularities on the sphere*, HAL preprint no. 00319299, (2011), 1–29. \leftrightarrow 92.
- [BC12] B. Bonnard & O. Cots, *Geometric numerical methods and results in the control imaging problem in nuclear magnetic resonance*, *Math. Models Methods Appl. Sci.*, to appear, (2012). \leftrightarrow vi, 23, 51 et 99.
- [BCC11] B. Bonnard, J.-B. Caillau & O. Cots, *Energy minimization in two-level dissipative quantum control: The integrable case*, *Discrete Contin. Dyn. Syst. suppl.* (2011), 198–208. Proceedings of the 8th AIMS Conference on Dynamical Systems, Differential Equations and Applications, Dresden, May 2010. \leftrightarrow v, 23, 40, 89, 91, 92 et 99.
- [BCG⁺02] U. Boscain, G. Charlot, J.-P. Gauthier, S. Guérin & H.-R. Jauslin, *Optimal control in laser-induced population transfer for two and three-level quantum systems*, *J. Math. Phys.*, 43 (2002), no. 5, 2107–2132. \leftrightarrow 90.
- [BCG⁺12] B. Bonnard, O. Cots, S. 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. \leftrightarrow vi, 23, 51, 57 et 99.

- [BCPS12] B. Bonnard, O. Cots, J.-B. Pomet & N. Shcherbakova, *Riemannian metrics on 2d-manifolds related to the Euler-Poinsot rigid body motion*, submitted to Ann. Inst. H. Poincaré Anal. Non Linéaire, (2012). \leftrightarrow 101.
- [BCS09] B. Bonnard, M. Chyba & D. Sugny, *Time-minimal control of dissipative two-level quantum systems: the generic case*, IEEE Trans. Automat. Control, **54** (2009), no. 11, 2598–2610. \leftrightarrow 54, 57 et 90.
- [BCS11] B. Bonnard, O. Cots & N. Shcherbakova, *Energy minimization problem in two-level dissipative quantum control: meridian case*, J. Math. Sci., **145** (2011), no. 5. \leftrightarrow v, 23, 40, 89 et 99.
- [BCS12] B. Bonnard, O. Cots & N. Shcherbakova, *The Serret-Andoyer Riemannian metric and Euler-Poinsot rigid body motion*, submitted to Math. Control Relat. Fields, (2012). \leftrightarrow 101.
- [BCSS10] B. Bonnard, O. Cots, N. Shcherbakova & D. Sugny, *The energy minimization problem for two-level dissipative quantum systems*, J. Math. Phys., **51** (2010), no. 9 092705, 44. \leftrightarrow v, 23, 40, 89, 90 et 99.
- [BCST09] B. Bonnard, J.-B. Caillau, R. Sinclair & M. Tanaka, *Conjugate and cut loci of a two-sphere of revolution with application to optimal control*, Ann. Inst. H. Poincaré Anal. Non Linéaire, **26** (2009), no. 4, 1081–1098. \leftrightarrow 92 et 93.
- [BCT05] B. Bonnard, J.-B. Caillau & E. Trélat, *Cotcot: short-reference manual*. apo.enseeiht.fr/cotcot, Rapport de recherche RT/APO/05/1, Institut National Polytechnique de Toulouse, Toulouse, France (2005). \leftrightarrow vii et 22.
- [BCT07a] B. Bonnard, J.-B. Caillau & E. Trélat, *Second order optimality conditions in the smooth case and applications in optimal control*, ESAIM Control Optim. Calc. Var., **13** (2007), no. 2, 207–236. \leftrightarrow vii, 11, 13, 15, 22 et 66.
- [BCT07b] B. Bonnard, J.-B. Caillau & E. Trélat, *Second order optimality conditions with applications*, Discrete Contin. Dyn. Syst., suppl. (2007), 145–154. Proceedings of the 6th AIMS International Conference, Dynamical Systems and Differential Equations. \leftrightarrow 11 et 13.
- [BE02] R. Bertrand & R. Epenoy, *New smoothing techniques for solving bang-bang optimal control problems—numerical results and statistical interpretation*. Optimal Control Appl. Methods, **23** (2002), no. 4, 171–197. \leftrightarrow 46.
- [Ber03] M. Berger, *A panoramic view of Riemannian geometry*, Springer-Verlag, Berlin (2003), xxiv+824. \leftrightarrow 92.
- [Bet98] J. T. Betts, *Survey of Numerical Methods for Trajectory Optimization*, AIAA J. of Guidance, Control and Dynamics, **21** (1998), 193–207. \leftrightarrow 25.
- [Bet10] J. T. Betts, *Practical methods for optimal control using nonlinear programming*, vol. 19 of *Advances in Design and Control*, Soc. for Industrial and Applied Math., Philadelphia, PA, USA, second edn. (2010), xiv+434. \leftrightarrow 25.
- [BHY98] G. Bydder, J. Hajnal & I. Young, *MRI: Use of the inversion recovery pulse sequence*, Clinical Radiology, **53** (1998), no. 3, 159–176. \leftrightarrow 63.
- [BK93] B. Bonnard & I. Kupka, *Théorie des singularités de l'application entrée/sortie et optimalité des trajectoires singulières dans le problème du temps minimal*, Forum Math., **5** (1993), no. 2, 111–159. \leftrightarrow 13 et 58.

- [Boc81] H. G. Bock, *Numerical treatment of inverse problems in chemical reaction kinetics*, vol. 18 of *Springer Series in Chemical Physics*, Eds. K. H. Ebert, P. Deuffhard & W. Jäger, in *Modelling of Chemical Reaction Systems*, Springer, Heidelberg, (1981), 102–125. \leftrightarrow 28.
- [BP84] H. Bock & K. Plitt, *A multiple shooting algorithm for direct solution of optimal control problems*, Pergamon Press, (1984), 243–247. Proceedings of the 9th IFAC World Congress, Budapest. \leftrightarrow 25.
- [BP04] U. Boscain & B. Piccoli, *Optimal syntheses for control systems on 2-D manifolds*, vol. 43 of *Mathématiques & Applications*, Springer-Verlag, Berlin (2004). \leftrightarrow 57.
- [BS09] B. Bonnard & D. Sugny, *Time-minimal control of dissipative two-level quantum systems: the integrable case*, *SIAM J. Control Optim.*, **48** (2009), no. 3, 1289–1308. \leftrightarrow 54.
- [BS12] B. Bonnard & D. Sugny, *Optimal Control with Applications in Space and Quantum Dynamics*, vol. 5 of *Applied Mathematics*, AIMS (2012). \leftrightarrow 1, 7, 57 et 90.
- [BSS11] B. Bonnard, N. Shcherbakova & D. Sugny, *The smooth continuation method in optimal control with an application to quantum systems*, *ESAIM Control Optim. Calc. Var.*, **17** (2011), no. 1, 267–292. \leftrightarrow 19.
- [Cai00] J.-B. Caillau, *Contribution à l'étude du contrôle en temps minimal des transferts orbitaux*, Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Toulouse, Toulouse, France (2000). \leftrightarrow v.
- [CBD⁺10] M. Carl, M. Bydder, J. Du, A. Takahashi & E. Han, *Optimization of RF Excitation to Maximize Signal and T(2) Contrast of Tissues With Rapid Transverse Relaxation*, *Magnetic Resonance In Medecine*, **64** (2010), no. 2, 481–490. \leftrightarrow 63.
- [CCG10] J.-B. Caillau, O. Cots & J. Gergaud, *HAMPATH: on solving optimal control problems by indirect and path following methods*, apo.enseeiht.fr/hampath (2010). \leftrightarrow vi, 23, 39, 66 et 95.
- [CCG11] J.-B. Caillau, O. Cots & J. Gergaud, *Differential continuation for regular optimal control problems*, *Optimization Methods and Software*, **27** (2011), no. 2, 177–196. \leftrightarrow 7, 23 et 99.
- [CD12] J.-B. Caillau & B. Daoud, *Minimum time control of the circular restricted three-body problem*, submitted to *SIAM J. Control Optim.*, (2011). \leftrightarrow 21.
- [Ces83] L. Cesari, *Optimization-theory and applications: problems with ordinary differential equations*, vol. 17 of *Applications of mathematics*, Springer-Verlag, New York, 1983, xiv+542. \leftrightarrow 25.
- [CGN03] J.-B. Caillau, J. Gergaud & J. Noailles, *3D Geosynchronous Transfer of a Satellite: Continuation on the Thrust*, *J. Optim. Theory Appl.*, **118** (2003), no. 3, 541–565. \leftrightarrow 47 et 48.
- [Dao11] B. Daoud, *Contribution au controle optimal du problème circulaire restreint des trois corps*, Thèse de doctorat, Université de Bourgogne (2011). \leftrightarrow 23 et 99.
- [dC92] M. P. do Carmo, *Riemannian geometry*, Mathematics: Theory & Applications. Birkhäuser Boston Inc., Boston, MA (1992). \leftrightarrow 11.

- [DDCHD90] J. J. Dongarra, J. Du Croz, S. Hammarling & I. S. Duff, *A set of level 3 basic linear algebra subprograms*, ACM Trans. Math. Softw., **16** (1990), no. 1, 1–17. \leftrightarrow 28.
- [DDCHH88] J. J. Dongarra, J. Du Croz, S. Hammarling & R. J. Hanson, *An extended set of fortran basic linear algebra subprograms*, ACM Trans. Math. Softw., **14** (1988), no. 1, 1–17. \leftrightarrow 28.
- [Dem06] J. Demailly, *Analyse numérique et équations différentielles*, Collection Grenoble Sciences. EDP Sciences (2006). \leftrightarrow 21.
- [Gef97] S. Geffroy, *Généralisation des techniques de moyennation en contrôle optimal - Application aux problèmes de transfert et rendez-vous orbitaux à poussée faible*, Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Toulouse, Toulouse, France (1997). \leftrightarrow v.
- [GH06] J. Gergaud & T. Haberkorn, *Homotopy Method for minimum consumption orbit transfer problem*, ESAIM Control Optim. Calc. Var., **12** (2006), no. 2, 294–310. \leftrightarrow 46 et 47.
- [GKS76] V. Gorini, A. Kossakowski & E. C. G. Sudarshan, *Completely positive dynamical semigroups of n -level systems*, J. Math. Phys., **17** (1976), no. 5, 821–825. \leftrightarrow v.
- [GZ79] C. B. García & W. I. Zangwill, *An approach to homotopy and degree theory*, Math. Oper. Res., **4** (1979), no. 4, 390–405. \leftrightarrow 19.
- [Hab04] T. Haberkorn, *Transfert orbital à poussée faible avec minimisation de la consommation : résolution par homotopie différentielle*, Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Toulouse, Toulouse, France (2004). \leftrightarrow vii, 22 et 36.
- [Hag00] W. Hager, *Runge-kutta methods in optimal control and the transformed adjoint system*, Numerische Mathematik, **87** (2000), no. 2, 247–282. \leftrightarrow 25.
- [HMG04] T. Haberkorn, P. Martinon & J. Gergaud, *Low thrust minimum-fuel orbital transfer: a homotopic approach*, J. Guid. Control Dynam., **27** (2004), no. 6, 1046–1060. \leftrightarrow 47.
- [HP12] L. Hascoët & V. Pascual, *The Tapenade Automatic Differentiation tool: principles, model, and specification*, Rapport de recherche RR-7957, INRIA (2012). \leftrightarrow 23.
- [HrW93] E. Hairer, S. P. Nørsett & G. Wanner, *Solving Ordinary Differential Equations I, Nonstiff Problems*, vol. 8 of *Springer Serie in Computational Mathematics*, Springer-Verlag, second edn. (1993). \leftrightarrow 24, 28 et 32.
- [HW96] E. Hairer & G. Wanner, DOPRI5. <http://www.unige.ch/~hairer/prog/nonstiff/dopri5.f> (1996). \leftrightarrow 24.
- [Jur97] V. Jurdjevic, *Geometric control theory*, vol. 52 of *Cambridge Studies in Advanced Mathematics*, Cambridge University Press, Cambridge (1997). \leftrightarrow 1.
- [KGB05] N. Khaneja, S. J. Glaser & R. Brockett, *Erratum: "Sub-Riemannian geometry and time optimal control of three spin systems: quantum gates and coherence transfer" [Phys. Rev. A (3) **65** (2002), no. 3, part A, 032301, 11 pp.; mr1891763]*, Phys. Rev. A (3), **71** (2005), no. 3, part B 039906, 1. \leftrightarrow v, 51 et 90.

- [KRK⁺05] N. Khaneja, T. Reiss, C. Kehlet, T. Schulte-Herbruggen & S. J. Glaser, *Optimal control of coupled spin dynamics: design of nmr pulse sequences by gradient ascent algorithms*, J. Magn. Reson., **172** (2005), no. 2, 296–305. \leftrightarrow 115.
- [Kup87] I. Kupka, *Geometric theory of extremals in optimal control problems. i. the fold and maxwell case*, Trans. Amer. Math. Soc., **299** (1987), no. 1, 225–243. \leftrightarrow 5 et 56.
- [Lap11] M. Lapert, *Développement de nouvelles techniques de contrôle optimal en dynamique quantique : de la RMN à la Physique moléculaire*, Thèse de doctorat, Université de Bourgogne (2011). \leftrightarrow 52, 57, 82 et 115.
- [Las09] J.-B. Lasserre, *Moments, positive polynomials and their applications*, Imperial College Press, London, UK (2009). \leftrightarrow 88.
- [Lev01] M. Levitt, *Spin Dynamics: Basics of Nuclear Magnetic Resonance*, John Wiley & Sons (2001). \leftrightarrow v.
- [LHKK79] C. L. Lawson, R. J. Hanson, D. R. Kincaid & F. T. Krogh, *Basic linear algebra subprograms for fortran usage*, ACM Trans. Math. Softw., **5** (1979), no. 3, 308–323. \leftrightarrow 28.
- [LHPT08] J.-B. Lasserre, D. Henrion, C. Prieur & E. Trélat, *Nonlinear optimal control via occupation measures and LMI relaxations*, SIAM J. Control Opt., **47** (2008), no. 4, 1643–1666. \leftrightarrow 88.
- [Lin76] G. Lindblad, *On the generators of quantum dynamical semigroups*, Comm. Math. Phys., **48** (1976), no. 2, 119–130. \leftrightarrow v.
- [LZB⁺10] M. Lapert, Y. Zhang, M. Braun, S. J. Glaser & D. Sugny, *Singular extremals for the time-optimal control of dissipative spin $\frac{1}{2}$ particles*, Phys. Rev. Lett., **104** (2010), 083001. \leftrightarrow 58, 60 et 62.
- [Man78] R. Mannshardt, *One-step methods of any order for ordinary differential equations with discontinuous right-hand side*, Numer. Math., **31** (1978), no. 2, 131–152. \leftrightarrow 32.
- [Mar60] L. Markus, *Quadratic differential equations and non-associative algebras*, vol. V of *Contributions to the theory of nonlinear oscillations* Princeton Univ. Press, Princeton, N.J. (1960), 185–213. \leftrightarrow 64.
- [Mar05] P. Martinon, *Résolution numérique de problèmes de contrôle optimal par une méthode homotopique simpliciale*, Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Toulouse, Toulouse, France (2005). \leftrightarrow vii, 22 et 36.
- [Mau76] H. Maurer, *Numerical solution of singular control problems using multiple shooting techniques*, J. Optim. Theory Appl., (1976). \leftrightarrow 29.
- [MG07] P. Martinon & J. Gergaud, *Using switching detection and variational equations for the shooting method*, Optimal Control Appl. Methods, **28** (2007), no. 2, 95–116. \leftrightarrow 32 et 46.
- [MGH80] J. J. Moré, B. S. Garbow & K. E. Hillstom, *User Guide for MINPACK-1*, ANL-80-74, Argonne National Laboratory, (1980). \leftrightarrow 27.

- [MM96] K. Malanowski & H. Maurer, *Sensitivity analysis for parametric control problems with control-state constraints*, *Comput. Optim. Appl.*, **5** (1996), no. 3, 253–283. \leftrightarrow 47.
- [Moï85] N. Moïsséev, *Problèmes mathématiques d'analyse des systèmes*, Traduit du Russe: Mathématiques. [Translations of Russian Works: Mathematics]. “Mir”, Moscow (1985). \leftrightarrow 67.
- [OT97] H. J. Oberle & K. Taubert, *Existence and multiple solutions of the minimum-fuel orbit transfer problem*, *J. Optim. Theory Appl.*, **95** (1997), no. 2, 243–262. \leftrightarrow 44.
- [PBG83] L. S. Pontryagin, V. G. Boltyanskiï, R. V. Gamkrelidze & E. F. Mishchenko, *Matematicheskaya teoriya optimalnykh protsessov*, “Nauka”, Moscow, fourth edn. (1983). \leftrightarrow 1.
- [Pow70] M. J. D. Powell, *A hybrid method for nonlinear equations*, In P. Rabinowitz, ed., *Numerical Methods for Nonlinear Algebraic Equations*, Gordon and Breach (1970). \leftrightarrow 27.
- [PS05] L. Poggiolini & G. Stefani, *Minimum time optimality for a bang-singular arc: second order sufficient conditions*, In *Decision and Control, 2005 European Control Conference. CDC-ECC '05. 44th IEEE Conference on*. 1433–1438. \leftrightarrow 101.
- [PS08] L. Poggiolini & G. Stefani, *Sufficient optimality conditions for a bang-singular extremal in the minimum time problem*, *Control Cybernet*, **37** (2008), no. 2, 469–490. \leftrightarrow 101.
- [SB93] J. Stoer & R. Bulirsch, *Introduction to numerical analysis*, vol. 12 of *Texts in Applied Mathematics*, Springer-Verlag, New York, second edn. (1993). \leftrightarrow 25 et 29.
- [SKL⁺06] T. E. Skinner, K. Kobzar, B. Luy, M. R. Bendall, W. Bermel, N. Khaneja & S. J. Glaser, *Optimal control design of constant amplitude phase-modulated pulses: Application to calibration-free broadband excitation*, *J. Magn. Reson.*, **179** (2006), no. 2, 241–249. \leftrightarrow 115.
- [ST10a] C. Silva & E. Trélat, *Asymptotic approach on conjugate points for minimal time bang-bang controls*, *Systems Control Lett.*, **59** (2010), no. 11, 720–733. \leftrightarrow 34 et 35.
- [ST10b] C. Silva & E. Trélat, *Smooth regularization of bang-bang optimal control problems*, *IEEE Trans. Automat. Control*, **55** (2010), no. 11, 2488–2499. \leftrightarrow 47.
- [Sus99] H. J. Sussmann, *Geometry and optimal control*, In *Mathematical control theory*, Springer, New York (1999), 140–198. \leftrightarrow 1.
- [Tré12] E. Trélat, *Optimal control and applications to aerospace: some results and challenges*, *J. Optim. Theory Appl.*, **154** (2012), no. 3, 52. \leftrightarrow 17.
- [VM06] G. Vossen & H. Maurer, *On L^1 -minimization in optimal control and applications to robotics*, *Optimal Control Appl. Methods*, **27** (2006), no. 6, 301–321. \leftrightarrow 47.
- [WSM⁺97] L. T. Watson, M. Sosonkina, R. C. Melville, A. P. Morgan & H. F. Walker, *Algorithm 777: HOMPACT90: a suite of Fortran 90 codes for globally convergent homotopy algorithms*, *ACM Trans. Math. Software*, **23** (1997), no. 4, 514–549. \leftrightarrow 36.

Geometric optimal control: homotopic methods and applications

Abstract: This work is about geometric optimal control applied to celestial and quantum mechanics. We first dealt with the minimum fuel consumption problem of transferring a satellite around the Earth. This brought to the creation of the code HAMPATH which permits first of all to solve optimal control problem for which the command law is smooth. It is based on the Pontryagin Maximum Principle (PMP) and on the notion of conjugate point. This program combines shooting method, differential homotopic methods and tools to compute second order optimality conditions. Then we are interested in quantum control. We study first a system which consists in two different particles of spin $1/2$ having two different relaxation time. Both sub-systems are driven by the same control. The problem consists in bringing to zero the magnetization of one of the two system while maximizing the magnetization of the second one. This problem comes from contrast imaging in Nuclear Magnetic Resonance and consists in maximising the contrast between two areas of the image. The use of geometrical and numerical tools has given a very precise sub-optimal synthesis for two particular cases (deoxygenated/oxygenated blood and cerebrospinal fluid/water cases). The last contribution of this thesis is about the Lindblad equations in the two-level case. The model is based upon the minimisation of the transfer energy. We restrict the study to a particular case for which the Hamiltonian given by the PMP is Liouville integrable. We describe the conjugate and cut loci for this Riemannian with drift problem.

Keywords: Geometric optimal control, second order conditions, cut and conjugate loci, shooting methods, differential homotopy, automatic differentiation, orbital transfer, quantum control, contrast imaging in NMR.

Résumé : Le contexte de ce travail est le contrôle optimal géométrique appliqué à la mécanique céleste et au contrôle quantique. On s'est tout d'abord intéressé au problème de transfert orbital de satellite autour de la Terre à consommation minimale, qui amena à la réalisation du code HAMPATH, permettant tout d'abord la résolution de problème de contrôle optimal dont la loi de commande est lisse. Il se base sur le Principe du Maximum de Pontryagin (PMP) et sur la notion de point conjugué. Ce programme combine méthode de tir, méthodes homotopiques différentielles et calcul des conditions d'optimalité du deuxième ordre. Nous nous intéressons par la suite au contrôle quantique. On étudie tout d'abord le contrôle d'un système composé de deux types de particules de spin $1/2$ ayant des temps de relaxation différents et dont la dynamique est gouvernée par les équations de Bloch. Ces deux sous-systèmes, correspondant aux deux types de particules, sont couplés par un même contrôle (un champ électromagnétique), le but étant alors d'amener la magnétisation des particules du premier type à zéro tout en maximisant celle du second (dans un système de coordonnées bien choisi). Ce modèle intervient en imagerie médicale par Résonance Magnétique Nucléaire et consiste à maximiser le contraste entre deux régions d'une même image. L'utilisation des outils géométriques et numériques aura permis de donner une très bonne synthèse sous-optimale pour deux cas particuliers (mélange sang oxygéné/désoxygéné et liquide cébrospinal/eau). La dernière contribution de cette thèse porte sur l'étude d'un système quantique à deux niveaux d'énergie dont la dynamique est régie par les équations de Lindblad. Le modèle est basé sur la minimisation d'énergie du transfert. On se restreint à un cas particulier pour lequel le Hamiltonien donné par le PMP est Liouville intégrable. On décrit alors les lieux conjugués et de coupure pour ce problème riemannien avec dérive.

Mots clés : Contrôle optimal géométrique, conditions du deuxième ordre, lieux conjugués et de coupure, méthodes de tir, homotopie différentielle, différenciation automatique, transfert orbital, contrôle quantique, contraste en RMN.
