ULISSES ALVES MACIEL NETO

RASTREAMENTO ADIABÁTICO DE ENSEMBLES QUÂNTICOS VIA MEDIANIZAÇÃO

Dissertação apresentada à Escola Politécnica da Universidade de São Paulo para obtenção do Título de Mestre em Ciências.

São Paulo, SP 2016

ULISSES ALVES MACIEL NETO

RASTREAMENTO ADIABÁTICO DE ENSEMBLES QUÂNTICOS VIA MEDIANIZAÇÃO

Dissertação apresentada à Escola Politécnica da Universidade de São Paulo para obtenção do Título de Mestre em Ciências.

Área de Concentração: Engenharia de Sistemas

Orientador:

Prof. Dr. Paulo Sérgio Pereira da Silva

São Paulo, SP 2016

Este exemplar foi revisado e corrigido em responsabilidade única do autor e com a a	relação à versão original, sob anuência de seu orientador.
São Paulo, de	de
Assinatura do autor:	
Assinatura do orientador:	

Catalogação-na-publicação

Maciel Neto, Ulisses Alves Rastreamento adiabáticos de ensembles quânticos via medianização / U.
A. Maciel Neto -- versão corr. -- São Paulo, 2016. 84 p.
Dissertação (Mestrado) - Escola Politécnica da Universidade de São Paulo. Departamento de Engenharia de Telecomunicações e Controle.
1.Controle (Teoria de Sistemas e Controle) 2.Mecânica Quântica
3.Sistemas Dinâmicos I.Universidade de São Paulo. Escola Politécnica. Departamento de Engenharia de Telecomunicações e Controle II.t.

Dedico este trabalho à memória de Josefa Lopes Maciel, avó querida que me incentivou aos estudos desde o início de minha existência até sua partida.

AGRADECIMENTOS

Gostaria de agradecer ao meu orientador, Prof. Dr. Paulo Sérgio Pereira da Silva, pela inestimável orientação, paciência e compreensão em todos os momentos turbulentos pelos quais passei durante os últimos anos.

Também merece agradecimento minha família: Mirian Luciano Maciel (mãe) e Armando Lopes Maciel (pai, em memória); Priscila Maciel e Luciene Maciel (irmãs); André Maciel Carnelós, Ingrid Maciel Cotrick, Pâmela Maciel Cotrick e Samuel Maciel Cotrick (sobrinhos); Callas (minha cachorra e companheira).

Toda minha jornada acadêmica teve início no Instituto de Matemática e Estatística da USP, local onde colecionei amigos insubistituíveis. Agradeço enormemente a todos eles e em especial ao Carlos Antonio Filho (Nuvem Negra) e à Maria Fernanda Araújo de Resende, os quais acompanharam mais de perto minhas aventuras em terras desconhecidas (um matemático na Engenharia). Também agradeço à Profa. Dra. Gladys Chalom do IME por todo o incentivo recebido desde a época em que fui seu aluno de Iniciação Científica e à Profa. Dra. Adriana de Oliveira Delgado da UFSCAR (câmpus Sorocaba), antiga colega de trabalho cuja carta de recomendação ajudou-me no ingresso do programa que agora concluo.

Meus poucos amigos de Sorocaba foram muito importantes nos momentos difíceis. Externo aqui minha sincera satisfação em ter podido contar com Camila Martins Rufino, Katiuscia Moreira, Crislaine Silva e Marina Cardoso.

Finalmente, meu agradecimento especial vai para duas pessoas iluminadas que surgiram em minha vida para corroborar com a teoria de que somos muito mais fortes quando não estamos sozinhos: Luiz Virgulino Filho, a quem serei eternamente grato por toda ajuda material que recebi no momento que mais precisei (inclusive me fornecendo o notebook no qual escrevi todo esse trabalho) e Diego Alves Soares pelo imenso apoio emocional nos últimos meses, quando o fôlego já se esvaía.

RESUMO

Este trabalho aborda o problema da inversão do **vetor** momento magnético, com ampla aplicação na Ressonância Nuclear Magnética (RNM). Em vez de uma sequência de impulsos e de abordarmos somente o problema de conduzir o vetor de $-e_3$ para $+e_3$, escolhemos uma lei de controle limitada e analisamos o processo de várias iterações (voltas completas). Através do método da medianização, obtemos uma solução explícita aproximada para o sistema e, através dela e de alguns teoremas auxiliares sobre rotações, discutimos a propagação do erro em módulo e fase cometido após a realização dessas iterações.

ABSTRACT

This dissertation considers the problem of inversion of the magnetic moment vector, with wide application in Nuclear Magnetic Resonance (NMR). Instead of a pulse sequence and only approach the problem of driving the vector from $-e_3$ to $+e_3$, we choose limited controls and we analyze several iterations of the process (laps). By the averaging method, we obtain an approximate explicit solution for the system and through this method, together with some auxiliary theorems on rotations, we discuss the propagation of error in magnitude and phase committed after performing these iterations.

RÉSUMÉ

Cette thèse s'agit d'un problème sur l'inversion du vecteur moment magnétique, avec une large gamme d'applications dans la Résonance Magnétique Nucléaire(RMN). Au lieu d'une séquence d'impulsions, et d'aborder seulement la conduction du vecteur de e_3 à $+e_3$, nous avons choisi les contrôles limités et nous avons analysé le processus de plusieurs interactions (tours complets). Par la méthode de la moyennisation, nous avons obtenu une solution explicite approchée pour le système et, à travers certains théorèmes auxiliaires sur les rotations, nous avons discuté la propagation de l'erreur en module et la phase engagée après la réalisation de ces interactions

SUMÁRIO

Lista de Ilustrações

1	Intr	odução	11
	1.1	Apresentação	11
	1.2	Objetivos	14
	1.3	Contribuições originais	15
	1.4	Organização	17
2	Prel	iminares matemáticos	19
	2.1	Conceitos básicos	19
	2.2	O método da medianização	21
	2.3	O produto vetorial	24
	2.4	Eixo e ângulo de Euler	26
3	O co	ontrole adiabático	29
	3.1	O modelo matemático	29
	3.2	Introdução da lei de controle	31
	3.3	O propagador adiabático	38
4	Den	nonstrações dos lemas, proposições e teoremas	45
5	Aná	lise de sensibilidade aos parâmetros	66

Referências		83	
6	Con	clusões	81
	5.4	Erro por medianização	75
	5.3	Variação da inomogeneidade em radiofrequência δ	75
	5.2	Variação da frequência de Larmor ω	70
	5.1	Variação do período T	67

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

1	Inicialmente os spins do ensemble apontam em direções aleatórias	
	(a), mas após a inserção de um campo magnético uniforme B_0 (b),	
	alinham-se na direação deste	12
2	Movimento de precessão do vetor momento magnético $M(t, \omega, \delta)$ den-	
	tro da esfera de Bloch	13
3	Quanto mais próximo está o vetor de magnetização M de $-e_3$ após	
	o ciclo, maior a probabilidade de, ao efetuar-se a medição, obtermos	
	como resultado $-e_3$	15
4	Numa medição do vetor de estados $M(t, \omega, \delta)$, a probabilidade da ob-	
	tenção de um ou outro resultado não se altera com a direção para o	
	qual está apontando	16
5	Quanto menor forem as amplitudes das oscilações, melhor a mediani-	
	zação aproximará a função original	22
6	O resultado do produto vetorial entre dois vetores $u \in v \in \mathbb{R}^3$ produz	
	um vetor que é simultaneamente perpendicular a u e a v	25
7	Podemos imaginar uma rotação em \mathbb{R}^3 que preserva a norma como um	
	movimento rígido dos eixos coordenados em torno de um eixo fixo, o	
	chamado eixo de Euler	27
8	Exemplo de uma trajetória do vetor de magnetização M que, num inter-	
	valo de 0 a 100 segundos varia de $-e_3$ a $+e_3$. Notemos que a trajetória	
	se dá sobre uma esfera unitária (esfera de Bloch)	30
9	Gráficos de a e b quando o período $T = 100$ s	32

10	Gráficos de B_1 e $\dot{\phi}$ quando o período $T = 100$ s e $\kappa = 5$ no caso constante.	34
11	Gráficos de <i>u</i> e <i>v</i> quando o período $T = 100$ s e $\kappa = 5$ no caso constante.	35
12	Gráficos de B_1 e $\dot{\phi}$ quando o período $T = 100$ s e $\kappa = 5$ no caso ímpar.	36
13	Gráficos de <i>u</i> quando o período $T = 100$ s e $\kappa = 5$ no caso ímpar	36
14	Gráficos de <i>v</i> quando o período $T = 100$ s e $\kappa = 5$ no caso ímpar	37
15	Variação de α conforme aumentamos ou diminuímos os parâmetros ω	
	e δ . Por mais que varie-se os parâmetros, α é sempre limitada	41
16	Comportamento da componente M_3 conforme o aumento do período	
	T no caso constante	68
17	Comportamento da componente M_3 conforme o aumento do período	
	T no caso ímpar.	69
18	Variação da componente M_3 para diferentes valores de ω no caso cons-	
	tante	70
19	Variação da componente M_3 para diferentes valores de ω no caso ímpar.	71
20	Variação da componente M_3 para $\omega = 0.5$ e $T = 100$ s no caso constante.	71
21	Variação da componente M_3 para $\omega = 0.5$ e $T = 100$ s no caso ímpar.	72
22	Variação da componente M_3 para $\omega = 0.5$ e $T = 1000$ s no caso constante.	73
23	Variação da componente M_3 para $\omega = 0.5$ r $T = 1000$ s no caso ímpar.	73
24	Variação da componente M_3 para $\omega = 0.5$ e $\kappa = 5$ no caso constante.	74
25	Variação da componente M_3 para $\omega = 0.5$ e $\kappa = 5$ no caso ímpar	74
26	Variação da componente M_3 para diversos valores de δ no caso constante.	75
27	Variação da componente M_3 para diversos valores de δ no caso ímpar.	76
28	Variação da componente M_3 para valores baixos de δ no caso constante.	76

29	Variação da componente M_3 para valores baixos de δ no caso ímpar.	77
30	Comparação do erro por medianianização nos três casos. Quando au-	
	mentamos o número de iterações, somente no caso desbalanceado o	
	erro é assintoticamente estável.	78
31	No caso desbalanceado, o erro por medianização após n iterações	
	nunca ultrapassa o dobro do erro cometido na primeira iteração. No	
	caso ímpar o erro é estritamente crescente	79
32	Apesar de conseguirmos reduzir o erro por medizanização a valores	
	baixos no caso ímpar, o mesmo é estritamente crescente	80

1 INTRODUÇÃO

1.1 Apresentação

No processo de ressonância nuclear magnética, uma das etapas consiste na inversão do vetor momento magnético dos prótons dos átomos de hidrogênio. O momento magnético, no caso dos prótons (que têm carga positiva), possui a mesma direção e sentido do spin. Inicialmente, os momentos magnéticos nucleares apontam para direções aleatórias, fazendo com que não haja uma magnetização macroscópica. Entretanto, quando submetidos a um forte campo magnético uniforme, os prótons se comportam como uma pequena bússola, tendendo a alinhar-se paralela (estado de menor energia) ou antiparalelamente a este (estado de maior energia)¹.

Supondo como configuração inicial do sistema os vetores de momento magnéticos já alinhados por um campo magnético B_0 , nosso objetivo é agir sobre B_0 de modo que os vetores de estado dos prótons que se encontram no estado de menor energia passem ao estado de maior energia.

Fixando um sistema de coordenadas no qual a direção de \mathbf{B}_0 é o eixo *z* e o seu sentido apontando para baixo, podemos dizer que queremos levar os vetores de estado dos momentos magnéticos que encontram-se em $-e_3$ a um estado final próximo de $+e_3$ em um tempo $T > 0^2$. Durante esse processo, o vetor momento magnético realiza

¹Na verdade esse alinhamento não é perfeito e os vetores de estado formam um pequeno ângulo com $-e_3$ ou $+e_3$.

²Por razões inerentes à Mecânica Quântica, a qual não é determinística, não é possível precisar que



Figura 1: Inicialmente os spins do *ensemble* apontam em direções aleatórias (a), mas após a inserção de um campo magnético uniforme B_0 (b), alinham-se na direação deste.

um movimento de precessão em torno de um eixo dentro da chamada esfera de Bloch.

A esfera de Bloch é utilizada na representação de um sistema quântico de dois níveis. Para o leitor menos familiarizado com a Mecânica Quântica, daremos aqui uma breve explicação do que isso significa. Muitas grandezas do mundo microscópico apresentam-se quantizadas, isto é, ao serem medidas não podem assumir quaisquer valores e sim alguns valores pré-determinados dentro de um conjunto discreto. No caso de um sistema quântico de dois níveis, ao se realizar uma medição sobre a variável de interesse, esta pode assumir somente dois valores possíveis. Entretanto, antes da medição, a variável pode apresentar um estado de superposição desses dois estados e a forma como isso acontece influencia na probabilidade de obtermos um resultado ou outro quando realizamos uma medida sobre ela. Uma maneira de

o vetor de estados saiu de um estado estacionário para outro sem realizar uma medição e, portanto, consequente colapso da função de onda.

representar isso geometricamente é utilizando uma esfera centrada em 0 e raio 1, um vetor com centro na origem cuja extremidade varia dentro da esfera representando o estado (no caso, M) e, para cada medida realizada, adotamos dois vetores opostos (no caso, $+e_3$ e $-e_3$) como representantes do resultado. Informalmente, quanto mais "próximo" vetor de estados M estiver de um ou outro no instante da medição, maior será a probabilidade de, ao se realizar a medida, obtermos aquele resultado. Como a "distância" aos polos da esfera depende somente da coordenada na direção de e_3 do vetor M, a fase desse vetor (ângulo entre a projeção de M no plano xy e o eixo x) é irrelevante na influência sobre a probabilidade de obtenção de determinado resultado.



Figura 2: Movimento de precessão do vetor momento magnético $M(t, \omega, \delta)$ dentro da esfera de Bloch

O que temos então é um típico problema de controle, isto é, existe uma grandeza física a qual desejamos conduzir, em tempo finito, de um estado inicial a um estado final bem definidos. Mais que isso, queremos controlar toda uma família de sistemas, que denominaremos *ensemble*, através de uma única ação sobre o campo magnético

estático (um único vetor de controle).

1.2 Objetivos

Nesse trabalho, abordamos o problema de controlar um *ensemble* (conjunto com um número muito grande de sistemas com dinâmicas que diferem por um parâmetro) que varia lentamente, levando-o de um estado inicial $-e_3$ (comum a todos os elementos do *ensemble*) a passar por um estado intermediário $+e_3$ e fazendo-o retornar ao estado original $-e_3$, repetindo esse ciclo por *n* vezes, onde *n* é um inteiro positivo qualquer. Como a cada ciclo um pequeno erro é cometido (o vetor de estados nunca fica sobreposto exatamente a $+e_3$ e a $-e_3$ após sair da condição inicial), é natural perguntar-se se, após *n* iterações, conseguimos controlar a propagação do erro. Será que ainda assim, após tantas repetições do ciclo, existe uma lei de controle adequada que faz com que o vetor de estados, apesar de não sobreposto, fique suficientemente próximo de $-e_3$? Veremos que sim, isto é, é possível, para uma escolha adequada dos parâmetros de nossas funções de entrada, fazer com que o erro final cometido fique inferior a duas vezes o erro cometido na primeira iteração (o qual é tão pequeno quanto mais lentamente se realizar o ciclo).

A Mecânica Quântica diz que, ao realizarmos uma medição no sistema, este assumirá somente dois estados ($-e_3 e + e_3$). Apesar de termos duas possibilidades, as probabilidades de obtermos essas medidas não é igual e depende do estado que tínhamos imediatamente antes da medição. Logo, quanto mais próximos conseguirmos deixar o estado da medida desejada, mais alta será a probabilidade de a obtermos posteriormente (por isso é importante que o vetor de estados do momento magnético do próton de hidrogênio fique o quanto mais próximo se consiga de $-e_3$ após os *n* ciclos).

Outra questão a ser observada é para qual direção aponta o vetor de estados



Figura 3: Quanto mais próximo está o vetor de magnetização M de $-e_3$ após o ciclo, maior a probabilidade de, ao efetuar-se a medição, obtermos como resultado $-e_3$.

dentro da esfera de Bloch ao final de todo esse processo. Pela Mecânica Quântica, essa pergunta seria irrelevante, já que a fase do vetor não influencia a probabilidade de se obter um resultado ou outro. Porém, verificaremos que, para que ao final de todos os ciclos o vetor de magnetização $M(\eta T, \omega, \delta)$, com $1 \le \eta \le n$, permaneça próximo de $-e_3$ é condição suficiente que consigamos limitar também a variação de sua fase, isto é, que após o *n*-ésimo ciclo $M(nT, \omega, \delta)$ tenha fase próxima a $M(T, \omega, \delta)$. As simulações mostrarão que essa condição é também suficiente, onde verificaremos que no único caso não coberto pelo teorema, teremos uma propagação ilimitada do erro.

1.3 Contribuições originais

Nossa contribuição é dar uma prova matemática afirmativa à questão do controle do vetor de estados do momento magnético tanto em relação à proximidade com o



Figura 4: Numa medição do vetor de estados $M(t, \omega, \delta)$, a probabilidade da obtenção de um ou outro resultado não se altera com a direção para o qual está apontando

estado desejado (módulo) quanto à direção que o mesmo adquire após a realização de *n* iterações do ciclo de levá-lo de $-e_3$ a e_3 e posteriormente retornar a $-e_3$.

A utilidade dessa contribuição seria uma ferramenta para uma possível solução adiabática para o problema tratado por [3]. Na solução proposta por [3] é utilizado um trem de impulsos para colocar o *ensemble* com condição incial comum em $-e_3$ a oscilar entre $+e_3$ e $-e_3$ (exatamente). Um outro controle é então utilizado para resolver um problema mais geral de controlabilidade do *ensemble* para condições inciais não comuns. Conjectura-se que a lei de controle aqui apresentada poderia substituir o trem de impulsos utilizado em [3].

1.4 Organização

Admitimos nesse trabalho que o leitor tenha algum contato prévio com conceitos básicos de sistemas dinâmicos. No capítulo 2, faremos algumas sessões com os preliminares matemáticos necessários para o entendimento do restante do trabalho. Na seção 2.1 apresentamos algumas definições básicas, como a de norma de um vetor, e enunciamos alguns teoremas básicos da Análise em \mathbb{R}^N . Na seção 2.2 discutimos o método da medianização (averaging), utilizado na demonstração do resultado principal do trabalho. O leitor que estiver interessado somente nos resultados e não em sua formalização e demonstração rigorosa, poderá pular essas seções e ir diretamente às seções 2.3, para entender a definição do operador *S*, que se faz presente ao longo de praticamente todo o trabalho, e, principalmente, a seção 2.4, onde discutimos o conceito de ângulo de Euler, essencial para o entendimento do resultado que buscamos.

O capítulo 3 é o que contém o conteúdo principal desse trabalho. Ali discutimos o modelo matemático (equações de Bloch) que governa a dinâmica de um sistema quântico de dois níveis submetido a um campo magnético estático B_0 , bem como enunciamos os resultados principais que contém nossa contribuição. Em virtude do caráter interdisciplinar desse trabalho, que pode interessar a engenheiros, físicos e matemáticos, optamos por omitir as demonstrações logo após o enunciado, deixandoas para o próximo capítulo. Assim, há maior fluência na leitura e compreensão dos resultados principais.

O capítulo 4 contém o enunciado e a demonstração de diversas proposições auxiliares que serão utilizadas na prova dos teoremas principais, as quais são apresentadas no final do capítulo. O leitor interessado em uma abordagem mais intuitiva e menos rigorosa pode pular esse capítulo sem prejuízo ao entendimento do restante do texto. Apesar disso, todas as demonstrações são feitas de maneira detalhada, de forma que apenas alguma familiaridade com argumentos de cunho matemático é exigida.

No capítulo 5 faremos diversas simulações, analisando a robustez do sistema dinâmico às variações dos diversos parâmetros envolvidos. Isso é de extrema importância por dois motivos. O primeiro deles é que, em nossas demonstrações, frequentemente recorreremos a tomar o período de cada iteração grande o suficiente. É natural, portanto, perguntar-se qual aproximadamente o valor do período que considerariamos adequado. O segundo motivo é que, por tratar-se de um ensemble (conjunto de muitos sistemas com dinâmicas semelhantes), precisamos verificar se todos os elementos do ensemble se comportarão da maneira esperada (mesmo os que possuem valor de dispersão um pouco mais distantes do ideal).

O capítulo 6 apresenta uma rápida síntese e conclusão das ideias apresentadas, bem como levanta alguns questionamentos que serão base para nossas pesquisas futuras.

2 PRELIMINARES MATEMÁTICOS

2.1 Conceitos básicos

Denotaremos por $[a,b] = \{x \in \mathbb{R} \mid a \le x \le b\}$ e $]a,b[=\{x \in \mathbb{R} \mid a < x < b\}$. Analogamente se define os intervalos [a,b[e]a,b].

DEFINIÇÃO 1. Dado o conjunto $\mathbb{R}^N = \{(x_1, ..., x_N)^\top | x_i \in \mathbb{R}, \beta = 1, ..., N\}$, definimos uma **norma** como sendo uma função $\|\cdot\| : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}$ tal que:

- $||x|| \ge 0$ para todo $x \in \mathbb{R}^N$, sendo que $||x|| = 0 \Leftrightarrow x = 0$.
- $||x + y|| \le ||x|| + ||y||$ para todos $x, y \in \mathbb{R}^N$.
- $||\alpha x|| = |\alpha|||x||$, para todo $\alpha \in \mathbb{R}$ e todo $x \in \mathbb{R}^N$

Existem diversas normas em \mathbb{R}^N , todas equivalentes. Neste trabalho, adotaremos sempre a norma $\|\cdot\|_2$ definida por

$$\|x\| = \|x\|_2 = \sqrt{x_1^2 + \ldots + x_N^2}$$
(2.1)

Denotaremos sempre a base canônica de \mathbb{R}^N por $\{e_1, \ldots, e_N\}$.

DEFINIÇÃO 2. Uma função $f: U \to \mathbb{R}^N$, com $U \subseteq \mathbb{R}^M$, diz-se contínua num ponto

 $a \in U se$

$$\forall \epsilon > 0 \ \exists \delta > 0 \ tal \ que \|x - a\| < \delta \Rightarrow \|f(x) - f(a)\| < \epsilon \tag{2.2}$$

A função f diz-se **contínua** se for contínua em todos os pontos de seu domínio. Uma função contínua também diz-se de classe C^0 .

DEFINIÇÃO 3. Uma função $f : I \to \mathbb{R}^N$, com $I \subset \mathbb{R}$ intervalo, diz-se contínua por partes se existe uma partição $\{I_j\}_{1 \le j \le k}$ finita do intervalo I tal que f restrita a cada I_j é contínua.

DEFINIÇÃO 4. Dada uma função $f: U \to \mathbb{R}^N$, com $U \subseteq \mathbb{R}^M$, se as derivadas parciais $\frac{\partial f_i}{\partial x_j}: U \to \mathbb{R}$, com $1 \le i \le N$ e $1 \le j \le M$, existirem e forem contínuas em U, dizemos que f é uma **função de classe** C^1 .

DEFINIÇÃO 5. Dada $f : U \to \mathbb{R}^N$, com U um conjunto aberto de \mathbb{R}^M . Dizemos que f é diferenciável em um ponto $a \in U$ se existir uma aplicação linear $T : \mathbb{R}^M \to \mathbb{R}^N$ tal que

$$f(a+v) - f(a) = T(v) + r(v), \text{ onde } \lim_{v \to 0} \frac{r(v)}{\|v\|} = 0$$
(2.3)

A transformação *T* evidentemente depende do ponto escolhido mas, fixado $a \in U$, ela é única. por isso denotamos T = df(a) e a chamamos de derivada de *f* no ponto *a*. Prova-se que toda função de classe C^1 é diferenciável.

Uma função bijetora f diferenciável cuja inversa f^{-1} também é diferenciável diz-se um **difeomorfismo**.

DEFINIÇÃO 6. Seja $f: U \to \mathbb{R}^N$, com U um conjunto aberto de \mathbb{R}^M . Dizemos que

f é uma **função de Lipschitz** em $U \subset \mathbb{R}^M$ se existir $c \in \mathbb{R}$, c > 0, tal que, para todos x, $y \in \mathbb{R}^M$ temos

$$||f(x) - f(y)|| \le c||x - y||$$
(2.4)

A constante c denomina-se constante de Lipschitz.

TEOREMA 1. (DA FUNÇÃO INVERSA) Seja $f : U \to \mathbb{R}^N$, de classe C^1 , definida no aberto $U \subset \mathbb{R}^N$ contendo um ponto a tal que $df(a) : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}^N$ é um isomorfismo. Então f é um difeomorfismo de um aberto V contendo a em um aberto W contendo f(a).

TEOREMA 2. Seja $f : [t_0, t_1] \times W \longrightarrow R^n$ contínua por partes em $[t_0, t_1]$ e Lipschitz em W com constante c, onde $W \subset R^n$ e um aberto conexo. Sejam y e z soluções de

$$\dot{y} = f(t, y), \ y(t_0) = y_0$$
 (2.5)

е

$$\dot{z} = f(t,z) + g(t,z), \ z(t_0) = z_0$$
(2.6)

tais que y(t), $z(t) \in W$ para todo $t \in [t_0, t_1]$. Suponha que $||g(t, x)|| \le \mu$ para todo $(t, x) \in [t_0, t_1] \times W$ e algum $\mu > 0$. Então

$$\|y(t) - z(t)\| \le \|y_0 - z_0\| \exp[c(t - t_0)] + \frac{\mu}{c} (\exp[c(t - t_0)] - 1)$$
(2.7)

2.2 O método da medianização

Para a maioria dos sistemas de equações diferenciais é muito difícil encontrar uma solução analítica fechada. Logo, matemáticos e demais cientistas têm desenvolvido diversos métodos visando encontrar soluções aproximadas que forneçam uma análise qualitativa e quantitativa satisfatória do sistema em questão. Existem duas classes de

métodos que em geral se dispõe para tal fim: numéricos e assintóticos. O método da medianização que definiremos nessa sessão é essencialmente um método assintótico.

Suponha que tenhamos a equação de estado

$$\dot{x} = f(t, x, \epsilon) \tag{2.8}$$

onde ϵ é um parâmetro escalar considerado pequeno e que, sob certas condições, a equação possua uma solução $x = x(t, \epsilon)$. O objetivo de um método assintótico é obter uma solução $\tilde{x} = \tilde{x}(t, \epsilon)$ tal que $||x(t, \epsilon) - \tilde{x}(t, \epsilon)||$ é "pequeno"para $|\epsilon|$ "pequeno"e a solução aproximada \tilde{x} seja expressa por uma equação diferencial mais simples do que a original.



Figura 5: Quanto menor forem as amplitudes das oscilações, melhor a medianização aproximará a função original

DEFINIÇÃO 7. Fixado ϵ um parâmetro pequeno e dadas duas funções $\delta_1 e \delta_2$, dize-

mos que $\delta_1(\epsilon) = O(\delta_2(\epsilon))$ se existem constantes positivas k e c tais que

$$\|\delta_1(\epsilon)\| = k\|\delta_2(\epsilon)\|, \text{ para todo } |\epsilon| < c \tag{2.9}$$

Uma função contínua e limitada $g : [0, +\infty[\times D \to \mathbb{R}^N \text{ possui uma$ **média** $} g_{av}(x)$ se o limite

$$g_{av}(x) = \lim_{T \to \infty} \frac{1}{T} \int_{t}^{t+T} g(\tau, x) d\tau$$
(2.10)

existe e

$$\left\| \left(\frac{1}{T} \int_{t}^{t+T} g(\tau, x) d\tau \right) - g_{av}(x) \right\| \le k\sigma(T), \quad \forall (t, x) \in [0, \infty[\times D_0 \qquad (2.11)$$

para todo conjunto fechado e limitado (compacto) $D_0 \subset D$, onde *k* é uma constante positiva (possivelmente dependente de D_0) e σ : $[0, \infty[\rightarrow [0, \infty[$ é uma função contínua, limitada e estritamente decrescente tal que $\sigma(T) \rightarrow 0$ quando $T \rightarrow \infty$. A função σ é chamada de função de convergência.

A partir desse conceito definimos o método assintótico da medianização da seguinte forma: dado um sistema da forma (2.5), definimos o sistema aproximado por medianização como

$$\dot{x} = \epsilon f_{av}(x) \tag{2.12}$$

onde $f_{av}(x)$ é a média de f(t, x, 0). Espera-se que a solução aproximada $\tilde{x}(t) = x_{av}(t)$ do sistema aproximado por medianização "não se afaste muito" da solução do sistema original.

Notemos aquilo que talvez seja a propriedade mais importante da aproximação por medianização. O sistema aproximado é autônomo, isto é, independe explicitamente da variável *t*. Podemos então transformar um sistema variante no tempo em invariante no tempo, o que nos possibilita utilizar uma ampla gama de propriedades para analisar o que ocorre "aproximadamente".

O método da medianização, assim como outros métodos assintóticos, é muito utilizado em sistemas que variam lentamente e que, portanto, não se afastam muito de um "comportamento médio". Um problema a ser superado é que nem sempre é fácil de acharmos a função de convergência σ para provar que a solução aproximada converge para a solução original quando $T \rightarrow \infty$. outra dificuldade é demonstrar a condição (2.11) para uma função não periódica.

Nesse trabalho, quando fizermos uso de tal método, utilizaremos alternativamente o Teorema 2 enunciado anteriormente para demonstrar a convergência.

2.3 O produto vetorial

Sejam $u = (u_1, u_2, u_3)$ e $v = (v_1, v_2, v_3)$ dois vetores em \mathbb{R}^3 . Definimos uma operação binária, denotada por \wedge e denominada **produto vetorial** como

$$u \wedge v = det \begin{bmatrix} i & j & k \\ u_1 & u_2 & u_3 \\ v_1 & v_2 & v_3 \end{bmatrix}$$
(2.13)

O produto vetorial goza, entre outras, das seguintes propriedades:

(i) $u \wedge (v + w) = u \wedge v + u \wedge w$

(ii) $\alpha u \wedge v = u \wedge \alpha v$

(iii) $u \wedge v = -v \wedge u$

para todos $\alpha \in \mathbb{R}$ e $u, v \in w \in \mathbb{R}^3$.

É interessante notar que o produto vetorial entre dois vetores é sempre um vetor perpendicular simultaneamente aos mesmos (binormal).



Figura 6: O resultado do produto vetorial entre dois vetores $u \in v \in \mathbb{R}^3$ produz um vetor que é simultaneamente perpendicular a $u \in a v$.

É fácil ver, realizando alguns cálculos, que o produto vetorial de dois vetores paralelos é igual a zero. Mais ainda, isso pode ser tomado como uma certa "medida de proximidade"de direção, isto é, se as direções dos vetores forem "quase"paralelas, seu produto vetorial terá um módulo pequeno (é fácil enxergar isso olhando para a fórmula do produto vetorial, pois as coordenadas do resultado é dada por **diferenças** entre as coordenadas dos vetores que estamos operando).

Ao longo desse trabalho, com frequência utilizaremos o produto vetorial entre as colunas de uma matriz e um vetor, originando-se uma nova matriz. Será necessário, portanto, darmos uma definição matematicamente rigorosa dessa operação, como segue abaixo.

Seja $c = (c_1, c_2, c_3) \in \mathbb{R}^3$, definimos o operador antisimétrico S(c) pela matriz

$$S(c) = \begin{bmatrix} 0 & -c_3 & c_2 \\ c_3 & 0 & -c_1 \\ -c_2 & c_1 & 0 \end{bmatrix}$$
(2.14)

PROPOSIÇÃO 1. *Dado um vetor arbitrário* $v \in \mathbb{R}^3$ *, temos que* $S(c)v = c \wedge v$ *.*

Com essa proposição, é imediato que o operador S(c), tal como foi definido, herda automaticamente as propriedades enunciadas acima para o produto vetorial.

2.4 Eixo e ângulo de Euler

É resultado conhecido que se *A* for um operador de *SO*(3) (grupo de rotações tridimensionais), então possui um autovetor associado ao autovalor unitário, isto é, Ae = e[12]. Logo, vemos que o vetor *e* é fixado pela rotação *A*. Ele pode ser considerado, portanto, como um eixo na qual ocorrem as demais rotações.

DEFINIÇÃO 8. *O vetor e, autovetor associado ao autovalor* 1 *e, portanto, fixo pela rotação A, é chamado de* **eixo de Euler**. *A amplitude da rotação em torno dele é chamada de* **ângulo de Euler**.

PROPOSIÇÃO 2. Seja $A \in SO(3)$. Quando a amplitude da rotação $\Phi \neq m\pi$, para algum $m \in \mathbb{Z}$, escrevendo $A = (A_{ij})$ para $1 \le i, j \le 3$ temos as relações:

$$\cos(\Phi) = \left[\frac{1}{2}(tr(A) - 1)\right] \tag{2.15}$$

$$e = \frac{1}{2\sin\Phi} [A_{23} - A_{32}, A_{31} - A_{13}, A_{12} - A_{21}]^{\top}$$
(2.16)



Figura 7: Podemos imaginar uma rotação em \mathbb{R}^3 que preserva a norma como um movimento rígido dos eixos coordenados em torno de um eixo fixo, o chamado eixo de Euler.

Ou seja, temos uma expressão analítica fechada para se calcular o eixo e ângulo de Euler.

Notemos que, quando A = I, o eixo de Euler não é unicamente determinado, já que I(v) = v para todo $v \in \mathbb{R}^3$ e, portanto, todos os vetores são autovetores associados ao autovalor 1. Essa observação, embora simples, desempenhará um papel essencial posteriormente em nossas considerações teóricas.

Outra observação importante é a de que dado um par (Φ, e) de um ângulo e eixo de Euler, existe um único operador de rotação para o qual esse par satisfaz as relações (2.15) e (2.16). A recíproca não é, contudo, verdadeira. Dado um operador $A \in SO(3)$, existem uma infinidade de pares (Φ, e) que satisfazem essas relações. Para isso, costuma-se aplicar a restrição $-\pi < \Phi < \pi$. Isso resolve a ambiguidade do ângulo e, embora não pareça, a do eixo também. Isso porque, se $v \in \mathbb{R}^3$ é um autovetor unitário de *A*, então -v também o é. Além disso, ambos são vetores diretores do mesmo eixo. Logo, embora a fórmula (2.16) dependa do sinal de sin(Φ), seja qual ele for, o eixo de rotação estará plenamente determinado.

3 O CONTROLE ADIABÁTICO

3.1 O modelo matemático

Nós consideraremos o *ensemble* $M(t, \omega, \delta)$ descrito pelas **equações de Bloch**

$$\dot{M}(t,\omega,\delta) = (\delta u(t)e_1 + \delta v(t)e_2 + \omega e_3) \wedge M(t,\omega,\delta)$$
(3.1)

onde

- *M*(*t*, ω, δ) é o vetor de magnetização do elemento do ensemble correspondente aos parâmetros ω e δ;
- ω ∈]ω_{*}, ω^{*}[, com -∞ < ω_{*} < 0 < ω^{*} < +∞ e ω_{*} = -ω^{*} é um parâmetro relacionado com a frequência de precessão em torno do eixo de cada elemento, chamado de frequência de Larmor;
- δ é um parâmetro relacionado à não homogeneidade do campo estático B₀ no elemento e satisfazendo 0 < δ ≤ 1;
- $\{e_1, e_2, e_3\}$ é a base canônica do \mathbb{R}^3 ;
- \wedge denota o produto vetorial em \mathbb{R}^3 e
- (*u*, *v*) será nossa lei de controle (funções de entrada que representam variações no campo magnético e escolhidas de maneira apropriada).

Enfatizamos que temos aqui toda uma família de equações diferenciais, parametrizadas por $\omega \in \delta$, onde cada membro descreve o comportamento dinâmico de um elemento do ensemble (no caso, da magnetização de um átomo de hidrogênio). Como o vetor de controle é único para toda a família, espera-se que os parâmetros $\omega \in \delta$ sofram pequenas variações de um elemento para outro do ensemble.

Para cada par (ω, δ) fixado, o vetor de magnetização $M(t, \omega, \delta)$ realiza sua trajetória sobre a esfera unitária (chamada de **esfera de Bloch**). A figura 8 mostra um exemplo de trajetória dentro da esfera de Bloch, gerada pelo MATLAB/Simulink, na qual o vetor de magnetização vai de $-e_3$ para $+e_3$ em um intervalo de 50 segundos.

Exemplo de uma trajetória do vetor de magnetização M sobre a esfera de Bloch



Figura 8: Exemplo de uma trajetória do vetor de magnetização M que, num intervalo de 0 a 100 segundos varia de $-e_3$ a $+e_3$. Notemos que a trajetória se dá sobre uma esfera unitária (esfera de Bloch)

Em linguagem formal, nosso problema então consiste em projetar uma lei de controle (u, v) = (u(t), v(t)) de modo que, no intervalo [0, T] tenhamos $M(0, \omega, \delta) = -e_3$,

$$M\left(\frac{T}{2},\omega,\delta\right) \cong e_3 \in M(T,\omega,\delta) \cong -e_3, \forall \omega \in]\omega_{\star}, \omega^{\star}[.$$

Para facilitar a notação, a partir de agora denotaremos $X = [0, T] \times]\omega_{\star}, \omega^{\star}[\times]0, 1].$

3.2 Introdução da lei de controle

Na prática, a magnitude da excitação que introduzimos no sistema (nossa lei de controle) é de 4 ou 5 ordens de grandeza inferior à do campo estático B_0 (por isso o sistema é adiabático, pois a lei de controle e, portanto, a Hamiltoniana, variam lentamente). Em virtude disso, para conseguir realizar nosso objetivo de conduzir o sistema de um estado a outro, nossas entradas precisarão oscilar com uma frequência relativamente alta (já que sua amplitude é relativamente pequena). [8]

Iremos definir nossa lei de controle da seguinte forma:

$$\bar{u}(t) = -B_1(t)\sin\phi(t) \tag{3.2}$$

$$\bar{v}(t) = B_1(t)\cos\phi(t) \tag{3.3}$$

onde ϕ é um função de classe C^1 e B_1 é, em princípio, uma função a ser determinada ¹.

Notemos que, como mencionado acima, temos uma lei de controle oscilatória com amplitude (B_1) e frequência (ϕ) que variam no tempo. Sejamos, pois, mais específicos em relação à lei de controle escolhida. Seja $k : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$ função constante

¹Uma interpreetação física é a de que $\dot{\phi}(t)$ e $B_1(t)$ representam, respectivamente, a velocidade e a amplitude da precessão no instante *t*

por partes tal que $|k(t)| > \omega^*$ para todo $t \in [0, T]$, iremos definir:

$$\dot{\phi}(t) = k(t)a(t), \ \phi(0) = 0$$
 (3.4)

$$B_1(t) = k(t)b(t)$$
 (3.5)

onde

$$a(t) = -\cos\left(\frac{2\pi}{T}t\right) \quad e \quad b(t) = \sin^2\left(\frac{2\pi}{T}t\right) \tag{3.6}$$



Figura 9: Gráficos de a e b quando o período T = 100 s.

Em princípio, se quiséssemos apenas realizar a transição do spin do estado de menor energia para o de energia mais alta (tal qual no exame de RNM tradicional), não haveria a necessidade de uma expressão tão complicada para nossas funções de entrada. De fato, essas expressões analíticas foram inferidas heuristicamente analisando condições suficientes para que pudéssemos realizar as várias iterações do processo de inversão do spin sem a propagação do erro. Desse modo, a lei de controle

definida acima **não é a única** a cumprir o objetivo de manter o vetor de magnetização de cada elemento do *ensemble* próximo de $-e_3$. Entretanto, cabe observar que a forma geral **deve** necessariamente ser como em (3.2) e (3.3).

Para melhor visizalizar o problema do rastreamento adiabático, iremos realizar uma transformação de coordenadas a fim de simplificar o sistema dinâmico:

Seja $H = \exp(-\phi S(e_3))$, isto é,

$$H(t) = \begin{bmatrix} \cos \phi(t) & \sin \phi(t) & 0 \\ -\sin \phi(t) & \cos \phi(t) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$
 (3.7)

PROPOSIÇÃO 3. Se Y = HM onde M é uma solução da equação de Bloch e H é dado como acima, então $\dot{Y} = S(\delta B_1 e_2 + (\omega - \dot{\phi})e_3)Y$. Em outras palavras, após a mudança de coordenadas, a velocidade angular não tem componente na direção de e_1 .

Definamos também o vetor v_1 por $v_1(t, \omega, \delta) = \delta B_1(t)e_2 + (\omega - \dot{\phi}(t))e_3$. Com isso, temos que $\dot{Y} = S(v_1)Y$. Podemos então dar uma interessante interpretação geométrica. Como nossos sistemas variam lentamente, teremos que $|\dot{Y}(t, \omega, \delta)|$ é pequena. Como \dot{Y} é o produto vetorial entre v_1 e Y, temos que eles devem ser próximos, quase paralelos, a todo instante t.

Na realidade, o vetor v_1 funciona como sendo o eixo de precessão que "guia"o vetor de magnetização (*Y* nas novas coordenadas) ao longo de sua trajetória na esfera de Bloch.

Seja $\alpha_1(t,\omega,\delta) = ||v_1(t,\omega,\delta)|| = \sqrt{\delta^2 B_1(t)^2 + (\omega - \dot{\phi}(t))^2}$ e denotaremos por $v(t,\omega,\delta) = \frac{v_1(t,\omega,\delta)}{\alpha_1(t,\omega,\delta)}$, que é a normalização de v_1 e, portanto, pertence à esfera de Bloch.
Segue das definições que $B_1(0) = B_1\left(\frac{T}{2}\right) = B_1(T) = 0$, $\dot{\phi}(0) = k(0)$, $\dot{\phi}(T) = k(T)$ e $\dot{\phi}\left(\frac{T}{2}\right) = -k\left(\frac{T}{2}\right)$. Portanto, teremos que $v(0,\omega,\delta) = \frac{\omega - k(0)}{|\omega - k(0)|}$. Como $k(t) > \omega^*$ para todo $t \in [0,T]$, segue que, se k(0) > 0, então $v(0,\omega,\delta) = -e_3$.

Pelo mesmo argumento, teremos que se k for uma função sempre positiva $v\left(\frac{T}{2}, \omega, \delta\right) = +e_3$ e $v(T, \omega, \delta) = -e_3$. Isso nos induz então a definir k como uma função constante positiva ao longo de todo o intervalo [0, T] e, realmente, esse será o primeiro caso:

1° caso (constante): $k(t) = \kappa > 0$, para todo $t \in [0, T]$.



Figura 10: Gráficos de B_1 e $\dot{\phi}$ quando o período T = 100 s e $\kappa = 5$ no caso constante.

Entretanto, nossas simulações e resultados teóricos mostrarão posteriormente que o 1º caso não é tão robusto quando os parâmetros de dispersão do *ensemble* sofrem "grandes"variações, bem como sua aproximação por medianização pode ser



Figura 11: Gráficos de *u* e *v* quando o período T = 100 s e $\kappa = 5$ no caso constante.

melhorada (fato importante quando investigamos propriedades do sistema original a partir das propriedades do sistema aproximado) se introduzirmos uma alguma simetria na função *k*. Iremos então definir:

2º caso (ímpar):
$$k(t) = \begin{cases} \kappa, & \text{se } t \in \left[0, \frac{T}{2}\right] \\ -\kappa, & \text{se } t \in \left[\frac{T}{2}, T\right] \end{cases}$$

Entretanto, existe um problema com a definição de k dessa forma. É que a mesma simetria que consegue minimizar o erro de medianização nos impede de calcular um eixo de Euler aproximado para as rotações do sistema ao final de cada iteração, pois recai exatamente no único caso fora das hipóteses do teorema (quando o vetor sofre uma rotação de π radianos). Uma solução para isso é considerarmos um terceiro caso, muito próximo do segundo, mas em que se elimine essa singularidade:



Figura 12: Gráficos de B_1 e $\dot{\phi}$ quando o período T = 100 s e $\kappa = 5$ no caso ímpar.



Figura 13: Gráficos de *u* quando o período T = 100 s e $\kappa = 5$ no caso ímpar.



Figura 14: Gráficos de v quando o período T = 100 s e $\kappa = 5$ no caso ímpar.

3º caso (desbalanceado): $k(t) = \begin{cases} \kappa, & \text{se } t \in \left[0, \frac{T}{2}\right] \\ -\kappa - \Delta, & \text{se } t \in \left[\frac{T}{2}, T\right] \end{cases}$ onde $0 < \Delta << \kappa$.

Retornando à heurística de nossos controles, citemos a amplitude $B_1(t)$. Se pensarmos geometricamente no movimento de M na esfera de Bloch, se "levantando"de $-e_3$ para próximo a $+e_3$ e depois "descendo"de próximo a $+e_3$ para próximo de $-e_3$, verificamos que ela deve valer zero em t = 0, $\frac{T}{2}$ e T e ter seu máximo no equador $\left(t = \frac{T}{4} + \frac{3T}{4}\right)$ [8]. Essa propriedade é evidente, por exemplo, no gráfico de b(t), mas poderíamos ter escolhido alguma outra função com essa propriedade.

A partir de agora esse trabalho seguirá no sentido de mostrar que esses contro-

les realmente funcionam, isto é, com a definição dada acima, é possível alcançar o objetivo inicialmente proposto. Embora nossas simulações evidenciem sua eficácia, a demonstração matemática desse fato é bastante trabalhosa e nos exigirá vários cálculos, definições, lemas auxiliares e a utilização dos teoremas enunciados no capítulo 1.

3.3 O propagador adiabático

Uma vez escolhidos os nossos controles, temos que o sistema dinâmico fica completamente determinado e podemos conhecer as trajetórias das soluções para cada condição inicial dada. Na teoria de sistemas dinâmicos lineares, existe o conceito de matriz de transição, que é uma forma de se caracterizar todas as soluções de uma só vez independente da condição inicial.

De fato, dado o sistema linear variante no tempo

$$\dot{x}(t) = A(t)x(t) \tag{3.8}$$

 $\operatorname{com} t \in [0, \infty[$, uma matriz de transição é um operador $\Phi : \mathbb{R} \to C^1[0, +\infty[$ tal que $\Phi(0) = I e \Phi(t)x(0) = x(t)$ para todo $t \in [0, \infty[$, onde x(t) é a solução do sistema acima no instante *t*.

Na Física, em especial na Mecânica Quântica, temos um operador com as mesmas características que é chamado de **propagador** ou operador de evolução temporal. Como nosso sistema varia lentamente (quase estático), chamaremos seu operador de evolução temporal de **propagador adiabático**.

O propagador do nosso sistema dinâmico corresponde a um operador unitário A

em um espaço normado tal que $M(t, \omega, \delta) = A(t, \omega, \delta)M(0, \omega, \delta)$ e $A(0, \omega, \delta) = I$ para todo $\omega \in]\omega_*, \omega^*[$ e para todo $0 < \delta \le 1$.

De fato, temos que tal operador $A(t, \omega, \delta) \in SO(3)$ satisfaz a equação diferencial

$$\dot{A}(t,\omega,\delta) = S\left(\bar{u}(t)e_1 + \bar{v}(t)e_2 + \omega e_3\right)A(t,\omega,\delta)$$
(3.9)

Dar uma fórmula fechada para o propagador A é bastante difícil, ainda mais se considerarmos que temos inúmeros parâmetros variantes a considerar. Partiremos então no sentido de dar um propagador candidato a aproximar A e depois demonstrar que essa aproximação realmente acontece. Para isso, recordemos a proposição 3, quando definimos o operador H e a observação logo abaixo, onde justificamos que o vetor $v(t, \omega, \delta)$ é uma boa aproximação para $M(t\omega, \delta)$ em virtude de termos uma variação lenta. Assim, queremos definir um operador $\tilde{A} : X \longrightarrow SO(3)$, que quando composto com H possui as propriedades de que $H(0)\tilde{A}(0, \omega, \delta) = I$ e $H(T)\tilde{A}(T\omega, \delta)(-e_3) = -e_3$.

Sem dúvida, o vetor $v(t, \omega, \delta)$ definido anteriormente pode servir-nos de inspiração, mas ele possui o inconveniente de que $v(T, \omega, \delta)$ pode ser $+e_3$ ou $-e_3$ dependendo do sinal de k e nós queremos ter uma certa flexibilidade na variação do sinal de kpara conseguirmos obter um controle mais robusto (menos sensível às variações dos parâmetros). Observemos então o seguinte, sejam $h = \frac{\omega}{k}$, $w(t, \omega, \delta) = \frac{\delta b}{\alpha}e_2 + \frac{h-a}{\alpha}e_3$ e $\alpha(t, \omega, \delta) = ||w(t, \omega, \delta)|| = \sqrt{(h-a)^2 + \delta^2 b^2}$:

$$v(t,\omega,\delta) = \frac{\delta B_1}{\alpha_1} e_2 + \frac{\omega - \dot{\phi}}{\alpha_1} e_3, \text{ mas } \alpha_1 = \sqrt{(\omega - \dot{\phi})^2 + \delta^2 B_1^2} = \sqrt{(kh - ka)^2 + \delta^2 k^2 b^2} = \sqrt{k[(h-a)^2 + \delta^2 b^2]} = |k| \underbrace{\sqrt{(h-a)^2 + \delta^2 b^2}}_{\alpha(t,\omega,\delta)}.$$

Portanto, $v(t,\omega,\delta) = \frac{\delta B_1}{\alpha_1}e_2 + \frac{\omega - \dot{\phi}}{\alpha_1}e_3 = \frac{\delta kb}{|k|\alpha}e_2 + \frac{kh - ka}{|k|\alpha}e_3 = \frac{k}{|k|}\underbrace{\left(\frac{\delta b}{\alpha}e_2 + \frac{h - a}{\alpha}e_3\right)}_{w(t,\omega,\delta)} = \underbrace{\frac{\delta B_1}{\alpha_1}e_2 + \frac{\omega - \dot{\phi}}{\alpha_1}e_3}_{w(t,\omega,\delta)} = \underbrace{\frac{\delta B_1}{\alpha$

 $\operatorname{sgn}(k)w(t,\omega,\delta).$ onde $\operatorname{sgn}(k) = \begin{cases} -1, & \operatorname{se} \quad k(t) < 0\\ 1 & \operatorname{se} \quad k(t) > 0 \end{cases}$

Podemos então definir $\tilde{A} = [\tilde{a}_1 \ \tilde{a}_2 \ \tilde{a}_3]$ da seguinte forma: $\tilde{a}_3 = w(t, \omega, \delta)$.

Como \tilde{A} deve fixar a primeira coordenada, é natural definirmos $\tilde{a}_1 = e_1$. Além disso, já que $\tilde{A}(t,\omega,\delta) \in SO(3)$ para todo $(t,\omega,\delta) \in X$, devemos obrigatoriamente definir $\tilde{a}_2 = \frac{h-a}{\alpha}e_2 - \frac{\delta b}{\alpha}e_3$. Portanto, construímos o operador \tilde{A} como:

$$\tilde{A}(t,\omega,\delta) = \frac{1}{\alpha(t,\omega,\delta)} \begin{bmatrix} \alpha(t,\omega,\delta) & 0 & 0\\ 0 & h(t,\omega) - a(t) & \delta b(t)\\ 0 & -\delta b(t) & h(t,\omega) - a(t) \end{bmatrix}$$
(3.10)

O leitor mais rigoroso deve ter se perguntado se essa definição faz sentido para todo $(t, \omega, \delta) \in X$, visto que não mostramos ainda que α nunca se anula (e a divisão por $\alpha(t, \omega, \delta)$ será recorrente ao longo de todo o trabalho). Além disso, utilizaremos frequentemente também o fato de α ser limitada. Resolveremos agora esses problemas com as proposições a seguir (que serão demonstradas no capítulo 4):

PROPOSIÇÃO 4. Seja $\alpha : X \longrightarrow \mathbb{R}$ definida por $\alpha(t, \omega, \delta) = \sqrt{(h(t, \omega) - a(t))^2 + \delta^2 b(t)^2}$. Então $\alpha(t, \omega, \delta) > 0$ para toda tripla $(t, \omega, \delta) \in X$.

PROPOSIÇÃO 5. Seja $\alpha : X \longrightarrow \mathbb{R}$ definida como na proposição anterior, então $\alpha(t, \omega, \delta) \leq 2$ para toda tripla $(t, \omega, \delta) \in X$.

Por fim, definiremos ainda o operador $F: X \longrightarrow SO(3)$ por

$$F(t,\omega,\delta) = \exp(\gamma(t,\omega,\delta)S(e_3))$$
(3.11)



Figura 15: Variação de α conforme aumentamos ou diminuímos os parâmetros $\omega e \delta$. Por mais que varie-se os parâmetros, α é sempre limitada.

onde

$$\gamma(t,\omega,\delta) = \int_{0}^{t} k(\tau)\alpha(\tau,\omega,\delta)d\tau \qquad (3.12)$$

Conforme ficará claro nas demonstrações, o operador F terá um papel importante no sentido de fazer com que o vetor solução obtido pela aproximação por medianização tenha uma fase "próxima"à do vetor de magnetização original.

Iremos agora enunciar um dos resultados principais desse trabalho, que é caracterização explícita do propagador adiabático a menos de um erro que decresce com o tamanho do período T.

TEOREMA 3. Seja A o propagador adiabático para o sistema dinâmico com nossa

conveniente escolha dos controles u e v, então

$$A = H^{\mathsf{T}}\tilde{A}F^{\mathsf{T}} + O\left(\frac{1}{T}\right) \tag{3.13}$$

Investigando esse resultado de maneira um pouco mais acurada, notemos que, pela definição, $H^{\top}\left(\frac{nT}{2}\right) = I$, assim como $F^{\top}\left(\frac{nT}{2}, \omega, \delta\right) = I$ para todo par (ω, δ) admissível (resultado esse demonstrado em detalhes no capítulo 4). Isso significa que próximo a $-e_3$ e $+e_3$, a dinâmica do sistema é preponderantemente influenciada por \tilde{A} (o qual foi definido anteriormente a partir de um comportamento desejado para o vetor de magnetizaçãoM). Portanto, os operadores H^{\top} e F^{\top} funcionam como uma espécie de "correção" para que nossa aproximação assintótica (que aproxima-se de A quando T cresce) valha para os demais instantes de tempo, isto é, para que a trajetória de $M(t) = A(t, \omega, \delta)M(0)$ e a trajetória obtida a partir de $H^{\top}(t)\tilde{A}(t, \omega, \delta)F^{\top}(t, \omega, \delta)M(0)$ sejam próximas para todo $t \in [0, T]$.

Ademais, esse resultado teórico terá papel fundamental em nosso objetivo, pois dar uma forma analítica fechada, mesmo que aproximadamente, para o propagador adiabático nos permitirá demonstrar os resultados importantes do controle do módulo e da fase do vetor de magnetização dos elementos do *ensemble*. O maior exemplo disso é a sua utilização na demonstração da possibilidade de construir, para uma escolha adequada da lei de controle, um eixo de Euler para $M(T, \omega, \delta) = A(T, \omega, \delta)(-e_3)$, ou seja, conseguimos controlar a fase de $M(T, \omega, \delta)$. A ideia intuitiva da prova (que será feita de maneira formal na seção seguinte) é obter um eixo de Euler (utilizando a proposição 2) para o propagador aproximado $A_{av}(T, \omega, \delta)(-e_3) = F^{T}(T)\tilde{A}(T, \omega, \delta)H^{T}(T)(-e_3)$. Como esse propagador converge para A à medida que aumentamos T, mostraremos que também nessa condição o eixo de Euler construído convergirá para o eixo de Euler de A. Vale ressaltar que a expressão analítica fechada para o "propagador aproximado" depende dos parâmetros que aparecem durante a definição dos controles, como era de se esperar, já que fixadas outras funções de entrada poderíamos ter uma dinâmica completamente diferente para o sistema.

O resultado que garante a possibilidade do controle da fase de M através da construção de um eixo de Euler ao final de cada iteração segue abaixo:

TEOREMA 4. Dado $\epsilon > 0$, escolhendo k = k(t) como no caso desbalanceado $e \Delta de$ maneira conveniente, é possível construir um propagador adiabático $A = A(t, \omega, \delta) e$ um eixo de Euler $e(\omega, \delta)$ de $A(T, \omega, \delta)$ para todos $(\omega, \delta) \in [\omega_{\star}, \omega^{\star}] \times]0, 1]$ de tal forma que $||A(t, \omega, \delta)(-e_3) - (-e_3)|| \le \epsilon e ||e(\epsilon) - (-e_3)|| < \epsilon$.

Vamos agora enunciar o resultado fundamental desse trabalho, o qual diz respeito ao controle sobre o módulo do vetor de magnetização, isto é, da probabilidade de obtermos $-e_3$ após *n* iterações. Devemos ter, portanto, que $M(nT, \omega, \delta)$ fica tão próximo quanto queiramos de $-e_3$, desde que consigamos, na primeira iteração, que $M(T, \omega, \delta)$ fique próximo o suficiente de $-e_3$, além de que seja possível construir um eixo de Euler para $M(T, \omega, \delta)$. Isso está contemplado no teorema abaixo.

TEOREMA 5. Seja A o propagador adiabático para nosso sistema de controle com as entradas u e v definidas como antes, com k = k(t) como no caso desbalanceado. Temos que, se $||A(T, \omega, \delta)(-e_3) - (-e_3)|| \le \epsilon$ para todo $(\omega, \delta) \in [\omega_{\star}, \omega^{\star}] \times]0, 1]$, então $||A(nT, \omega, \delta)(-e_3) - (-e_3)|| \le 2\epsilon$ para todo $(\omega, \delta) \in [\omega_{\star}, \omega^{\star}] \times]0, 1]$.

Recordando que $A(t, \omega, \delta)(-e_3)$ é a posição do vetor $M(t, \omega, \delta)$ no instante t com condição inicial $M(0, \omega, \delta) = -e_3$ (exatamente a que estamos considerando em nosso trabalho), esse teorema nos diz que, no instante nT, a posição do vetor M fica distante de $-e_3$ menos do que duas vezes o erro cometido após o primeiro ciclo (instante T). Logo, podemos fazer o erro tão pequeno quanto queiramos, bastando para isso fazer E como se deve proceder para que o erro na primeira iteração fique suficientemente pequeno? A resposta está no Teorema 3. Quando fazemos o período *T* grande o suficiente (e, consequentemente, o sistema variar lentamente), a posição final de $M(T, \omega, \delta)$ fica muito próxima de $-e_3$.

4 DEMONSTRAÇÕES DOS LEMAS, PROPOSIÇÕES E TEOREMAS

DEMONSTRAÇÃO DO TEOREMA 1: Ver [18].

DEMONSTRAÇÃO DO TEOREMA 2: Ver [13].

DEMONSTRAÇÃO DA PROPOSIÇÃO 1: Sejam $c, v \in \mathbb{R}^3$ onde $c = (c_1, c_2, c_3)^\top$ e

 $v = (v_1, v_2, v_3) \top$. Por definição, temos que

$$S(c)v = \begin{bmatrix} 0 & -c_3 & c_2 \\ c_3 & 0 & -c_1 \\ -c_2 & c_1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_2v_3 - c_3v_2 \\ c_3v_1 - c_1v_3 \\ c_1v_2 - c_2v_1 \end{bmatrix}$$

Por outro lado, temos que

$$c \wedge v = \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ c_1 & c_2 & c_3 \\ v_1 & v_2 & v_3 \end{vmatrix} = (c_2 v_3 - c_3 v_2) \vec{i} - (c_1 v_3 - c_3 v_1) \vec{j} + (c_1 v_2 - c_2 v_1) \vec{k}$$

e vemos que as duas expressões realmente são iguais.

DEMONSTRAÇÃO DA PROPOSIÇÃO 2: Ver [12].

DEMONSTRAÇÃO DA PROPOSIÇÃO 3: Como $\dot{H} = -\dot{\phi}S(e_3)H$ e notando que $H\xi = \delta B_1 e_1 + \omega e_3$, pois

	$\cos\phi(t)$	$\sin\phi(t)$	0	$\left[-\delta B_1(t)\sin\phi(t)\right]$		0
$H(t)\xi(t) =$	$-\sin\phi(t)$	$\cos\phi(t)$	0	$\delta B_1(t)\cos\phi(t)$	=	$\delta B_1(t)$
	0	0	1	ω		ω

Definindo, portanto, Y = HM onde M é uma solução da equação de Bloch, teremos

$$\dot{Y} = \dot{H}M + H\dot{M} = -\dot{\phi}S(e_3)HM + H(\xi \wedge M) = -\dot{\phi}S(e_3)Y + H\xi \wedge HM = -\dot{\phi}(e_3 \wedge Y) + H\xi \wedge HK = -\dot{\phi}(e_3 \wedge Y) + H\xi \wedge HK$$

Logo, podemos nos restringir ao modelo dado pelo seguinte sistema

$$\dot{Y} = S\left(\delta B_1 e_2 + (\omega - \dot{\phi})e_3\right)Y$$

Esse modelo simplificado após a mudança de coordenadas não depende da coordenada e_1 .

DEMONSTRAÇÃO DA PROPOSIÇÃO 4: Por definição, temos que $\alpha(t, \omega, \delta) \ge 0$ para toda tripla $(t, \omega, \delta) \in X$. Precisamos somente mostrar então que α nunca se anula. Suponhamos que exista $(t_0, \omega_0, \delta_0) \in X$ tal que $\alpha(t_0, \omega_0, \delta_0) = 0$. Então $\delta_0^2 b(t_0)^2 + (h(t_0, \omega_0) - a(t_0))^2 = 0$. Logo, devemos ter $\delta_0 b(t_0) = 0$ e $(h(t_0, \omega_0) - a(t_0))^2 = 0$. Se $\delta_0 b(t_0) = 0$, como $\delta_0 \in]0, 1]$ então $b(t_0) = 0$. Portanto, $\sin^2 \left(\frac{2\pi}{T}t_0\right) = 0$. Logo, $\sin\left(\frac{2\pi}{T}t_0\right) = 0$, o que implica que $t_0 = 0$ ou $t_0 = T$. Para qualquer um dos casos, teremos $a(t_0) = -1$ (pela definição de a). Logo, $h(t_0, \omega_0) - a(t_0) = 0 \Rightarrow h(t_0, \omega_0) + 1 = 0 \Rightarrow h(t_0, \omega_0) = -1$, o que é uma contradição, visto que $|k(t)| > \omega^*$ para todo $t \in [0, T] \Rightarrow |h(t, \omega)| = \left|\frac{\omega}{k(t)}\right| < 1$ para todo $t \in [0, T]$. **DEMONSTRAÇÃO DA PROPOSIÇÃO 5:** Como $\left|\frac{\omega}{k}\right| \le 1$ e $0 < \delta \le 1$, se definirmos $g_1(t) = \sqrt{(1-a)^2 + b^2}$ teremos $|\alpha(t, \omega, \delta)| \le |g_1(t)|$ para todo $(t, \omega, \delta) \in X$.

Como g_1 é função não negativa, segue que os máximos e mínimos de g são obtidos para os mesmos valores de t que minimizam ou maximizam $g = g_1^2$. Encontremos, então, esses pontos.

$$g(t) = (1 - a)^{2} + b^{2} \quad \text{implica} \quad \text{que} \quad \frac{dg}{dt} = 0 \iff -2(1 - a)\dot{a} + 2b\dot{b} = 2\left(1 + \cos\left(\frac{2\pi}{T}t\right)\right)\sin\left(\frac{2\pi}{T}t\right)\frac{2\pi}{T} + 2\sin^{2}\left(\frac{2\pi}{T}t\right)\left[2\sin\left(\frac{2\pi}{T}t\right)\cos\left(\frac{2\pi}{T}t\right)\frac{2\pi}{T}\right] = 4\frac{4\pi}{T}\sin\left(\frac{2\pi}{T}t\right)\left[\left(1 + \cos\left(\frac{2\pi}{T}t\right)\right) + 2\sin^{2}\left(\frac{2\pi}{T}t\right)\cos\left(\frac{2\pi}{T}t\right)\right] = 0$$

Logo, isso ocorre se $sin\left(\frac{2\pi}{T}t\right) = 0$, e daí t = 0 ou t = T, ou então se

$$\left[\left(1+\cos\left(\frac{2\pi}{T}t\right)\right)+2\sin^2\left(\frac{2\pi}{T}t\right)\cos\left(\frac{2\pi}{T}t\right)\right]=0$$

Fazendo a substituição de variáveis $X = \cos\left(\frac{2\pi}{T}t\right)$ e lembrando que, nesse caso, $\sin^2\left(\frac{2\pi}{T}t\right) = 1 - X^2$, teremos que $(1 + X) + 2(1 - X^2)X = 2X^3 - 3X - 1 = (X+1)(2X^2 - 2X - 1) = 0$, cuja única raiz real é -1.

Logo,
$$\cos\left(\frac{2\pi}{T}t\right) = -1$$
, o que implica que $t = \frac{T}{2}$.

Como g_1 é contínua em um conjunto fechado e limitado (compacto), ela possui máximo e mínimo nesse intervalo que deverão ser, necessariamente, os extremos do intervalo ou os máximos/mínimos locais encontrados (em nosso caso, os extremos do intervalo são dois dos três máximos/mínimos locais). Testando os valores de t encontrados em g_1 , teremos $g_1(0) = g_1(T) = 2 \text{ e } g_1\left(\frac{T}{2}\right) = 0.$

Assim, $\alpha(t, \omega, \delta) \leq 2$.

LEMA 1. Dado um operador $A \in SO(3)$ (rotação), temos que, para cada $c \in \mathbb{R}^3$,

$$AS(c) = S(Ac)A \tag{4.1}$$

Demonstração: Seja $v \in \mathbb{R}^3$, temos que $AS(c)v = A(c \wedge v) = Ac \wedge Av = S(Ac)Av$. Como *v* é arbitrário, segue a igualdade.

LEMA 2. Sejam \tilde{A} definido como antes e h definido por $h(t, \omega) = \frac{\omega}{|k(t)|}$. Então

$$\dot{\tilde{A}}^{\top} = S(h_1 e_1) \tilde{A}^{\top} \tag{4.2}$$

onde $h_1 = \frac{\delta(b\dot{a} + h\dot{b} - a\dot{b})}{\alpha^2}$

Demonstração: Não é difícil ver que, da definição de *h* e realizando algumas manipulações algébricas, podemos escrever

 $\tilde{A} = \begin{bmatrix} \tilde{a}_1 & \tilde{a}_2 & \tilde{a}_3 \end{bmatrix} \text{ onde } \tilde{a}_1 = e_1, \quad \tilde{a}_2 = \frac{h-a}{\alpha}e_2 - \frac{\delta b}{\alpha}e_3 \text{ e } \tilde{a}_3 = \frac{\delta b}{\alpha}e_2 + \frac{h-a}{\alpha}e_3$

Basta observarmos então que

$$\frac{\frac{d}{dt}h-a}{\frac{dt}{\alpha}} = \frac{-\dot{a}\alpha - (h-a)\dot{a}}{\alpha^2} = \frac{-\dot{a}\alpha - (h-a)\dot{a}}{\alpha^2} = \frac{-\dot{a}\alpha - \frac{(h-a)(\delta^2b\dot{b} - (h-a)\dot{a}}{\alpha}}{\alpha^2} = \frac{-\dot{a}(h-a)\delta^2b\dot{b} + (h-a)^2\dot{a}}{\alpha^3} = \frac{-\dot{a}(h-a)^2 - \delta^2b^2\dot{a} - (h-a)\delta^2b\dot{b} + (h-a)^2\dot{a}}{\alpha^3} = \frac{-\dot{a}(h-a)^2 - \delta^2b^2\dot{a} - (h-a)\delta^2b\dot{b} + (h-a)^2\dot{a}}{\alpha^3} = \frac{\delta^2ab\dot{b} - \delta^2b\dot{b} - \delta^2b^2\dot{a}}{\alpha^3} = \frac{\delta(ab - h\dot{b} - b\dot{a})}{\alpha^2}\frac{\delta b}{\alpha} = h_1\frac{\delta b}{\alpha}$$

$$\frac{\frac{d}{dt}}{\frac{\delta b}{\alpha}} = \frac{\delta\dot{b}\alpha - \delta b\dot{\alpha}}{\alpha^2} = \frac{\delta\dot{b}\alpha - \delta b\dot{\alpha}}{\alpha^2} = \frac{\delta\dot{b}\alpha - \delta b\dot{b}(\delta^2b^2 + (h-a)^2)}{\alpha^3} = \frac{\delta\dot{b}\alpha - \delta\dot{b}(\delta^2b^2 + (h-a)^2}{\alpha^3} = \frac{\delta\dot{b}\alpha - \delta\dot{b}\alpha - \delta\dot{b}(\delta^2b^2 + (h-a)^2}{\alpha^3} = \frac{\delta\dot{b}\alpha - \delta\dot{b}\alpha -$$

$$\frac{\delta b \dot{a} (h-a) - \delta^3 b^2 \dot{b} + b \delta^3 b^2 + \delta \dot{b} (h-a)^2}{\alpha^3} = \frac{\delta (h-a) (b \dot{a} + (h-a) \dot{b})}{\alpha^3} = \frac{\delta (h-a) (b \dot{a} + (h-a) \dot{b})}{\alpha^3} = \frac{\delta (h-a) (b \dot{a} + (h-a) \dot{b})}{\alpha^3}$$
Portanto, já que $\tilde{A}^{\mathsf{T}} = \frac{1}{\alpha} \begin{bmatrix} \alpha & 0 & 0 \\ 0 & h-a & -\delta b \\ 0 & \delta b & h-a \end{bmatrix} \Longrightarrow \tilde{A}^{\mathsf{T}} = \frac{1}{\alpha} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & h_1 \delta b & -h_1 (h-a) \\ 0 & h_1 (h-a) & h_1 \delta b \end{bmatrix}$
Agora, temos que $S (h_1 e_1) \tilde{A}^{\mathsf{T}} = \frac{1}{\alpha} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -h_1 \\ 0 & h_1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha & 0 & 0 \\ 0 & h-a & \delta b \\ 0 & -\delta b & h-a \end{bmatrix} = \frac{1}{\alpha} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & h_1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha & 0 & 0 \\ 0 & h-a & \delta b \\ 0 & -\delta b & h-a \end{bmatrix}$

LEMA 3.

$$\tilde{A}^{\top}S(\delta B_1 e_2 + (\omega - \dot{\phi})e_3) = S(k\alpha e_3)\tilde{A}^{\top}$$
(4.3)

$$\begin{aligned} \mathbf{Demonstração:} \quad \text{Temos, por definição, que } \tilde{A}^{\top}S(\delta B_{1}e_{2} + (\omega - \dot{\phi})e_{3}) = \\ \tilde{A}^{\top}S(\delta kbe_{2} + k(h - a)e_{3}) &= \frac{1}{\alpha} \begin{bmatrix} \alpha & 0 & 0 \\ 0 & h - a & -\delta b \\ 0 & \delta b & h - a \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & -k(h - a) & \delta kb \\ k(h - a) & 0 & 0 \\ -\delta kb & 0 & 0 \end{bmatrix} = \\ \frac{1}{\alpha} \begin{bmatrix} 0 & -k\alpha(h - a) & \alpha\delta kb \\ \frac{k(h - a)^{2} + k(\delta b)^{2}}{k\alpha^{2}} & 0 & 0 \\ k\delta b(h - a) - \delta kb(h - a) & 0 & 0 \end{bmatrix} = k \begin{bmatrix} 0 & -(h - a) & \delta b \\ \alpha & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Por outro lado,

$$S(k\alpha e_3)\tilde{A}^{\top} = \frac{1}{\alpha} \begin{bmatrix} 0 & -k\alpha & 0 \\ k\alpha & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha & 0 & 0 \\ 0 & h-a & -\delta b \\ 0 & \delta b & h-a \end{bmatrix} = k \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha & 0 & 0 \\ 0 & h-a & -\delta b \\ 0 & \delta b & h-a \end{bmatrix} =$$

$$k \begin{bmatrix} 0 & -(h-a) & \delta b \\ \alpha & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix},$$
o que confirma a igualdade. \blacksquare

LEMA 4.

$$\dot{F}^{\top} = -k\alpha S(e_3)F^{\top} \tag{4.4}$$

Demonstração: Basta notar que, pela definição, $F^{\top}(t, \omega, \delta) = \exp(-\gamma(t, \omega, \delta)S(e_3))$ e que $\dot{\gamma}(t, \omega, \delta) = \frac{d}{dt}k(t)\int_0^t \alpha(\tau, \omega, \delta)d\tau = k(t)\alpha(t, \omega, \delta).$

Logo, temos que $\dot{F}^{\top}(t,\omega,\delta) = -\dot{\gamma}(t,\omega,\delta)\exp(-\gamma(t,\omega,\delta)S(e_3)) = -k(t)\alpha(t,\omega,\delta)\exp(-\gamma(t,\omega,\delta)S(e_3)) = -k(t)\alpha(t,\omega,\delta)F^{\top}(t,\omega,\delta)$, o que demonstra a igualdade.

PROPOSIÇÃO 6. Considerando C, S, F e h_1 como definidos anteriormente, temos que C satisfaz a equação diferencial $\dot{C} = \frac{1}{T}S(h_2F^{\top}e_1)C$ com $h_2 = Th_1$.

Demonstração: Seja W = HA ($H(t) \in SO(3)$, $\forall t \in [0, T]$ e, portanto, satisfaz (4.1)), então

 $\dot{W} = \dot{H}A + H\dot{A} = -\dot{\phi}S(e_3)HA + HS(\xi)A = -\phi S(e_3)HA + S(H(\xi))HA = S(\delta B_1 e_2 + (\omega - \dot{\phi})e_3)HA$, e temos então que

$$\dot{W} = S\left(\delta B_1 e_2 + (\omega - \dot{\phi})e_3\right)W\tag{4.5}$$

Se $B = \tilde{A}^{\top}W$, então usando (4.2) e (4.5), teremos

$$\dot{B} = \dot{\tilde{A}}^\top W + \tilde{A}^\top \dot{W} = S(h_1 e_1) \tilde{A}^\top W + \tilde{A}^\top S(\delta B_1 e_2 + (\omega - \dot{\phi}) e_3) W = S(h_1 e_1) B + S(k\alpha e_3) B,$$

o que implica que

$$\dot{B} = S(h_1e_1 + k\alpha e_3)B \tag{4.6}$$

Agora, como $C = F^{\top}B$, utilizando (4.4) e (4.6), já que $F^{\top}(t, \omega, \delta) \in SO(3)$, $\forall (t, \omega, \delta) \in X$, temos que,

$$\dot{C} = \dot{F}^{\top}B + F^{\top}\dot{B} = -k\alpha S(e_3)F^{\top}B + F^{\top}S(h_1e_1 + k\alpha e_3)B = -k\alpha S(e_3)F^{\top}B + S(F^{\top}h_1e_1 + F^{\top}k\alpha e_3)F^{\top}B = -k\alpha S(e_3)F^{\top}B + S(F^{\top}h_1e_1)F^{\top}B + S(F^{\top}k\alpha e_3)F^{\top}B$$

Como
$$F^{\top}k\alpha e_3 = k\alpha F^{\top}e_3 = k\alpha e_3$$
, então temos que $\dot{C} = -k\alpha S(e_3)F^{\top}B + S(F^{\top}h_1e_1)F^{\top}B + S(F^{\top}k\alpha e_3)F^{\top}B = -k\alpha S(e_3)C + S(F^{\top}h_1e_1)C + k\alpha S(e_3)C$

Logo, teremos que

$$\dot{C} = S(F^{\top}h_1e_1)C \tag{4.7}$$

PROPOSIÇÃO 7. Utilizando a definição de α anteriormente feita, realizando a mudança de variáveis $\frac{d\theta}{dt} = \frac{\alpha}{\bar{\alpha}}, \ \theta(0) = 0, \ onde \ \bar{\alpha}(\omega, \delta) = \frac{1}{T} \int_0^T \alpha(\tau, \omega, \delta) d\tau \ temos \ \gamma(\theta) = k(\theta)\bar{\alpha}(\theta).$ Fazendo ainda $h_3 = \frac{\bar{\alpha}}{\alpha}h_2$, teremos que C satisfará a equação diferencial

$$\frac{dC}{d\theta} = \frac{1}{T} S(h_3 F^{\mathsf{T}} e_1) C \tag{4.8}$$

Demonstração: Pela regra da cadeia, temos que $\frac{dC}{dt} = \frac{dC}{d\theta} \cdot \frac{\alpha}{\bar{\alpha}}$.

Portanto, $\frac{dC}{d\theta} = \frac{\bar{\alpha}}{\alpha} \cdot \frac{dC}{dt} = \frac{\bar{\alpha}}{\alpha} S(F^{\top}h_1e_1)C = \frac{\bar{\alpha}}{\alpha} \cdot \frac{1}{T} \cdot S(F^{\top}h_2e_1)C = \frac{1}{T}S(F^{\top}\frac{\bar{\alpha}}{\alpha}h_2e_1)C = \frac{1}{T}S(F^{\top}h_3e_1)C$, o que confirma a igualdade.

PROPOSIÇÃO 8. Com as definições anteriores, temos que vale a desigualdade

$$\left\|\int_{0}^{T} (h_{3}F^{\top}e_{1})d\theta\right\| \le L/(k\bar{\alpha}) \tag{4.9}$$

para algum L > 0.

Demonstração: Primeiramente, sabemos a expressão de $F^{\top}(t, \omega, \delta)$, mas precisamos obter a expressão para $F^{\top}(\theta, \omega, \delta)$.

Da definição, segue que $\frac{d\gamma}{dt} = k\alpha$. logo, $\frac{d\gamma}{dt} = \frac{d\gamma}{d\theta}\frac{d\theta}{dt} \Rightarrow k\alpha = \frac{d\gamma}{d\theta}\frac{\alpha}{\bar{\alpha}} \Rightarrow \frac{d\gamma}{d\theta} = k\bar{\alpha}$.

Integrando de 0 a θ e usando que $\theta(0) = 0$, temos que

$$\int_0^\theta \frac{d\gamma}{d\tau} d\tau = \int_0^\theta k \bar{\alpha} d\tau \Rightarrow \gamma(\theta) = k \alpha \theta$$

Assim, teremos que $F^{\top}e_1 = (cos(k\bar{\alpha}\theta), -sin(k\bar{\alpha}\theta), 0)^{\top}$. Agora, partiremos no sentido de provar a desigualdade. Notemos que

$$\left\|\int_0^T (h_3 F^{\mathsf{T}} e_1) d\theta\right\| \le \left\|\int_0^T h_3 \cos(k\bar{\alpha}\theta) d\theta\right\| + \left\|\int_0^T h_3 \sin(k\bar{\alpha}\theta) d\theta\right\|$$

Provaremos então que cada um dos membros da segunda parte da igualdade é limitado para posteriormente obtermos a desigualdade desejada. Primeiramente, notemos que, como $h_3 = \frac{\bar{\alpha}}{\alpha} h_2$, então

$$\frac{dh_3}{dt} = \frac{dh_3}{d\theta}\frac{d\theta}{dt} \Rightarrow \frac{dh_3}{d\theta} = \frac{\bar{\alpha}}{\alpha}\frac{dh_3}{dt} = \frac{dh_2}{dt}$$

Mas, como $h_2 = Th_1$, recordando a definição de h_1 em termos de a, b e h, teremos que h_2 será dado pela expressão

$$h_2(t,\omega,\delta) = \frac{2\pi\delta}{\alpha^2} \left[\sin^3\left(\frac{2\pi}{T}t\right) \cos\left(\frac{2\pi}{T}t\right) - 2\sin\left(\frac{2\pi}{T}t\right) \cos\left(\frac{2\pi}{T}t\right) - \frac{2\omega}{k(t)}\sin\left(\frac{2\pi}{T}t\right) \right]$$

Portanto

$$\frac{dh_2}{dt} = \frac{1}{T} \frac{4\pi^2 \delta}{\alpha^2} \left[3\sin^2\left(\frac{2\pi}{T}t\right) \cos\left(\frac{2\pi}{T}t\right) - \sin^4\left(\frac{2\pi}{T}t\right) + 4\sin^2\left(\frac{2\pi}{T}t\right) - \frac{2\omega}{k(t)}\cos\left(\frac{2\pi}{T}t\right) - 2 \right]$$

Como α é uma função contínua estritamente positiva definida num intervalo fechado [0, *T*], temos então que α possui máximo e mínimo. Logo, seja α_{\star} esse mínimo e lembremos, ainda, que $0 < \delta \le 1$. Também, seja $\kappa_{\star} = min\{|k(t)| \ |t \in [0, T]\}$. Definamos $L_1 = \frac{4\pi^2}{\alpha_{\star}^2} \left(6 - \frac{2\omega}{\kappa_{\star}}\right)$ e então teremos que

$$\left|\frac{dh_2}{dt}\right| \le \frac{1}{T} \frac{4\pi^2 \delta}{\alpha_{\star}^2} \left(6 - \frac{2\omega}{k_{\star}}\right) \le \frac{1}{T} L_1$$

Da definição de h_3 também não é difícil ver que $|h_3| \le L_2$ para algum $L_2 > 0$, visto que é soma e produto de funções limitadas.

Aplicando integração por partes e usando que $\theta(T) = T$ (o que não é difícil verificar), teremos que

$$\int_0^T h_3 \cos(k\bar{\alpha}\theta) d\theta = h_3 \frac{\sin(k\bar{\alpha}T)}{k\bar{\alpha}} - \int_0^T \frac{dh_3}{d\theta} \frac{\sin(k\bar{\alpha}\theta)}{k\bar{\alpha}} d\theta$$

Seja $L' = L_1 + L_2$, segue que

$$\left\|\int_{0}^{T} h_{3}\cos(k\bar{\alpha}\theta)d\theta\right\| \leq \frac{1}{k\bar{\alpha}} \left[\left\|h_{3}\frac{\sin(k\bar{\alpha}T)}{k\bar{\alpha}}\right\| + \left\|\int_{0}^{T}\frac{dh_{3}}{d\theta}\frac{\sin(k\bar{\alpha}\theta)}{k\bar{\alpha}}d\theta\right\| \right] \leq \frac{1}{k\bar{\alpha}} \left[L_{2} + T \cdot \frac{1}{T}L_{1}\right] = \frac{1}{k\bar{\alpha}}L'$$

Como

$$\int_0^T h_3 \sin(k\bar{\alpha}\theta) d\theta = -h_3 \frac{\cos(k\bar{\alpha}\theta)}{k\bar{\alpha}} + \int_0^T \frac{dh_3}{d\theta} \frac{\cos(k\bar{\alpha}\theta)}{k\bar{\alpha}} d\theta$$

utilizando procedimento análogo, conseguimos mostrar que

$$\left\|\int_0^T h_3 \sin(k\bar{\alpha}\theta) d\theta\right\| \le \frac{1}{k\bar{\alpha}}L'$$

Tomando L = 2L' segue que

$$\left\|\int_{0}^{T} (h_{3}F^{\top}e_{1})d\theta\right\| \leq \left\|\int_{0}^{T} h_{3}\cos(k\bar{\alpha}\theta)d\theta\right\| + \left\|\int_{0}^{T} h_{3}\sin(k\bar{\alpha}\theta)d\theta\right\| \leq 2 \cdot \frac{1}{k\bar{\alpha}}L' = \frac{L}{k\bar{\alpha}}$$

PROPOSIÇÃO 9. Seja $C = F\tilde{A}^T HA$, onde F, \tilde{A} e H são definidos com anteriormente e A é o propagador adiabático relativo ao nosso sistema dinâmico para nossa particular escolha de u e v. Então

$$C = I + O\left(\frac{1}{T}\right) \tag{4.10}$$

Demonstração: Seja $\frac{dx}{d\theta} = \frac{1}{T}f(\theta, x)$ a equação diferencial referente às colunas de *C*, onde temos que $x \in S^2 \subset R^3$ e $f(\theta, x) = S(h_3 F^{\top} e_1)x$.

Vamos provar que esse sistema admite boa aproximação por medianização [7] (erro da ordem de $\frac{1}{T}$). Inicialmente, examinemos algumas propriedades que serão úteis futuramente.

Seja
$$f_{av}(y) = \frac{1}{T} \int_0^T f(\theta, y) d\theta = \frac{1}{T} \int_0^T S(h_3 F^{\mathsf{T}} e_1) y d\theta.$$

Como *S* é linear e preserva a norma, temos que que $\left\|\frac{\partial f_{av}}{\partial y}(y)\right\| =$

$$\left\|\frac{1}{T}\int_{0}^{T}(\frac{\partial}{\partial y}S(h_{3}F^{\top}e_{1})y)d\theta\right\| = \left\|\frac{1}{T}S(\int_{0}^{T}h_{3}F^{\top}e_{1}d\theta)\right\| = \left\|\frac{1}{T}\int_{0}^{T}h_{3}F^{\top}e_{1}d\theta\right\| \le \frac{L}{k\bar{\alpha}T}$$

Ainda, como h_3 é limitada por $\frac{L}{2}$ e $||F^{\top}e_1|| = 1$, temos que $\left\|\frac{\partial f}{\partial y}(\theta, y)\right\| = \left\|h_3 S(F^{\top}e_1)\right\| = \|h_3\| \le \frac{L}{2}$.

Definimos então $h(\theta, y) = f(\theta, y) - f_{av}(y)$ e seja $u(\theta, y) = \int_{0}^{\theta} h(\tau, y) d\tau$

Como f e f_{av} são lineares em y, é fácil verificar que $h(\theta, y) = \frac{\partial h}{\partial y}(\theta, y)y$ e $u(\theta, y) = \frac{\partial u}{\partial y}(\theta, y)y$

Do fato de
$$u(\theta, y) = \int_{0}^{\theta} h(\tau, u) d\tau = \int_{0}^{\theta} f(\tau, y) - f_{av}(y) d\tau = (\int_{0}^{\theta} f(\tau, y) d\tau) - f_{av}(y) \theta = \int_{0}^{\theta} f(\tau, y) d\tau - \frac{\theta}{T} \int_{0}^{T} f(\tau, y) d\tau.$$

Temos então que $\left\|\frac{\partial u}{\partial y}(\theta, y)\right\| = \left\|\int_{0}^{\theta} h_3 S(F^{\top} e_1) d\tau - \frac{\theta}{T} \int_{0}^{T} h_3 S(F^{\top} e_1) d\tau\right\| = \left\|\frac{\partial f}{\partial y}(\theta, y) - \frac{\partial f_{av}}{\partial y}(\theta, y)\right\| \le \frac{L}{2} + \frac{L}{k\bar{\alpha}T} \le \frac{L}{2} + \frac{L}{2} = L$, já que estamos supondo T suficientemente grande e, portanto, $k\bar{\alpha}T \ge 2$.

Definimos agora a seguinte mudança de variáveis:

$$x = y + \frac{1}{T}u(\theta, y) \tag{4.11}$$

Como
$$u(\theta, y) = \frac{\partial u}{\partial y}(\theta, y)y$$
, segue que $x = y + \frac{1}{T}\frac{\partial u}{\partial y}(\theta, y)y = \left[I + \frac{1}{T}\frac{\partial u}{\partial y}\right]y$.

Como provamos acima que $\|\frac{\partial u}{\partial y}(\theta, y)\|$ é limitada, para *T* suficientemente grande, teremos que $\left[I + \frac{1}{T}\frac{\partial u}{\partial y}\right]$ será invertível.

Para ver isso, basta considerarmos $Inv : \{M \in M_3(R) | det(M) \neq 0\} \rightarrow M_3(R)$ a aplicação definida por $Inv(M) = M^{-1}$. Essa aplicação satisfaz as hipóteses do Teorema de Função Inversa no ponto M = I [6] e, portanto, existe uma vizinhança aberta em torno de I tal que Inv é difeomorfismo local. Portanto, podemos fazer Tsuficientemente grande de modo de $\left[I + \frac{1}{T} \frac{\partial u}{\partial y}\right]$ pertença à essa vizinhança aberta e, portanto, seja invertível.

Ainda, como $\left\|\left[I + \frac{1}{T}\frac{\partial u}{\partial y}(\theta, y)\right]\right\| \le 1 + \frac{L}{T}$ e $\left\|x(\theta)\right\| = 1$ para todos θ , y, segue que $\left\|y(\theta)\right\| \le \frac{1}{1 - \frac{L}{T}}$.

Derivando em relação a θ , teremos, por um lado:

$$\frac{dx}{d\theta} = \frac{dy}{d\theta} + \frac{1}{T}\frac{\partial u}{\partial \theta} + \frac{1}{T}\frac{\partial u}{\partial y}\frac{dy}{d\theta}$$
(4.12)

Por outro lado, $\frac{dx}{d\theta} = \frac{1}{T}f(\theta, x) = \frac{1}{T}f(\theta, y + \frac{1}{T}u) e \frac{\partial y}{\partial \theta}(\theta, y) = f(\theta, y) - f_{av}(\theta, y)$. Logo,

$$\frac{1}{T}f(\theta, y + \frac{1}{T}u) = \frac{dy}{d\theta} + \frac{1}{T}f(\theta, y) - \frac{1}{T}f_{av}(y) + \frac{1}{T}\frac{\partial u}{\partial y}\frac{dy}{d\theta}$$

$$\Rightarrow \frac{1}{T} f_{av}(y) + \frac{1}{T} p(\theta, y) = \left[I + \frac{1}{T} \frac{\partial u}{\partial \theta} \right] \frac{dy}{d\theta}(\theta, y)$$

onde $p(\theta, y) = f(\theta, y + \frac{1}{T}u) - f(\theta, y)$

Usando o fato de que f é linear em y, temos:

$$\begin{split} \|p(\theta, y)\| &= \left\| f(\theta, y + \frac{1}{T}u) - f(\theta, y) \right\| = \|f(\theta, u)\| = \left\| S(h_3 F^{\top} e_1)u \right\| \\ &\leq \|h_3\| \left\| S(F^{\top} e_1) \right\| \|u\| \leq \frac{L}{2} \|u\| \leq \frac{L}{2} \left\| \frac{\partial u}{\partial y} \right\| \|y\| \end{split}$$

$$\leq \frac{L}{2} \cdot L \frac{1}{\left(1 - \frac{L}{T}\right)} = \frac{L^2}{2\left(1 - \frac{L}{T}\right)}$$

Como estamos supondo o sistema variando lentamente, para um valor de T suficientemente grande de tal modo que $\frac{L}{T} \le 0.5$, teremos

$$\|p(\theta, y)\| \leq \frac{L}{T}$$

Ainda, não é difícil verificar que $\left[I + \frac{1}{T}\frac{\partial u}{\partial y}\right]^{-1} = I + R$, onde $||R|| \le \frac{L}{T}$ (lembramos novamente que podemos tomar *T* suficientemente grande). Aplicando isso aos dois lados da última igualdade temos

$$\frac{dy}{d\theta} = \frac{1}{T}f_{av}(y) + \frac{1}{T}p(\theta, y) + \frac{1}{T}Rf_{av}(y) + \frac{1}{T}Rp(\theta, y)$$

o que implica que

$$\frac{dy}{d\theta} = \frac{1}{T} f_{av}(y) + q(\theta, y)$$

onde $q(\theta, y) = \frac{1}{T} p(\theta, y) + \frac{1}{T} R f_{av}(y) + \frac{1}{T} R p(\theta, y)$

Em virtude das limitações de ||R|| e $||p(\theta, y)||$, temos que $q(\theta, y) = \frac{1}{T^2}r(\theta, y)$ onde $||r(\theta, y)|| \le M$ para algum M > 0.

Assim, temos $\frac{dy}{d\theta} = \frac{1}{T} f_{av}(y) + \frac{1}{T^2} r(\theta, y).$

Fazendo a transformação de coordenadas (na escala do tempo) $s = \frac{\theta}{T}$, teremos

$$\frac{dy}{ds} = f_{av}(y) + \frac{1}{T}r(s,y)$$
 (4.13)

Seja z a solução de $\frac{dy}{ds} = f_{av}(z)$ tal que z(0) = y(0). Tomando, no Teorema 2, $t_0 = 0$,

 $\mu = M \text{ e } c = \frac{L}{k\bar{\alpha}}, \text{ obtemos}$

$$||y - z|| \le \frac{\frac{M}{T}}{\frac{L}{k\bar{\alpha}}} \left[\exp\left(\frac{sL}{k\bar{\alpha}}\right) - 1 \right]$$
(4.14)

Agora, observando que

$$\lim_{k \to \infty} \frac{\exp\left(\frac{sL}{k\bar{\alpha}}\right) - 1}{\frac{L}{k\bar{\alpha}} - 0} = s \left. \frac{d}{dt} e^t \right|_{t=0} = s$$

. .

e $0 \le s \le 1$, temos

$$\lim_{T \to \infty} \left(\lim_{k \to \infty} \frac{M}{T} \frac{L}{k\bar{\alpha}} \left[\exp\left(\frac{sL}{k\bar{\alpha}}\right) - 1 \right] \right) = \lim_{T \to \infty} \frac{M}{T} s = 0$$

Logo, para $k \in T$ suficientemente grandes, z converge para y.¹ Como a coluna que tomamos é arbitrária, temos que todas as colunas de C admitem uma aproximação por medianização. Assim, C admite uma aproximação por medianização e, portanto, verificando pela definição que C(0) = I podemos escrever

$$C(t) = \exp\left(\frac{1}{T}\int_0^T S(h_3 F^{\mathsf{T}} e_1)dt\right)C(0) + O\left(\frac{1}{T}\right)$$

Mas, como $\left\|\frac{1}{T}\int_0^T S(h_3 F^{\top} e_1)dt\right\| \le \frac{1}{T}\frac{L}{\kappa_{\star}\bar{\alpha}}$, temos que para T grande, $\frac{1}{T}\frac{L}{k\bar{\alpha}} \to 0$ e, portanto, $C(t) \to I$, como queríamos demonstrar.

DEMONSTRAÇÃO DO TEOREMA 3: Pela proposição 9, sabemos que *C* se comporta como a identidade *I* a menos de um erro da ordem de $\frac{1}{T}$ (ou seja, um erro que decresce conforme aumentamos o período *T* e fazemos o sistema variar cada vez

¹Apesar de suficiente, não é necessário, para essa convergência, tomar k grande. Bastaria fixarmos k e fazermos T suficientemente grande. Entretanto, na proposição 13 tomaremos k grande o suficiente para aqueles propósitos e poderia não ficar claro que aqui a convergência valeria ainda assim.

mais devagar). Teremos que

$$F\tilde{A}^{\top}HA = I + O\left(\frac{1}{T}\right) \tag{4.15}$$

Como todos os operadores envolvidos são ortogonais, temos

$$\left(H^{\top}\tilde{A}F^{\top}\right)^{-1}A = I + O\left(\frac{1}{T}\right)$$
(4.16)

Além disso, como todos os operadores pertencem ao grupo SO(3) (e, portanto, preservam a norma e não propagam o erro), temos que

$$A = H^{\top} \tilde{A} F^{\top} + O\left(\frac{1}{T}\right) \tag{4.17}$$

Essa é exatamente uma caracterização do operador *A* (o propagador adiabático) a qual procuramos. ■

Esse resultado teórico nos permite retornar à nossa pergunta inicial e explorar as boas propriedades do propagador aproximado de *A* em nossa investigação sobre o erro (módulo e fase) nas múltiplas iterações no procedimento de controle do vetor de momento magnético.

PROPOSIÇÃO 10. Para os três casos considerados (constante, ímpar e desbalanceado), temos que

$$A(T,\omega,\delta) = \exp(-\gamma(T,\omega,\delta)S(e_3)) + O\left(\frac{1}{T}\right) = \begin{bmatrix} \cos(\gamma(T,\omega,\delta)) & \sin(\gamma(T,\omega,\delta)) & 0\\ -\sin(\gamma(T,\omega,\delta)) & \cos(\gamma(T,\omega,\delta)) & 0\\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} + O\left(\frac{1}{T}\right)$$

Portanto,
$$A(T, \omega, \delta)(-e_3) = -e_3 + O\left(\frac{1}{T}\right)$$
.

Demonstração: Notemos primeiramente que a proposição diz que $A(T, \omega, \delta) = F^{\top}(T\omega, \delta) + O\left(\frac{1}{T}\right)$ pela definição de F que demos anteriormente. Como decorre do teorema 3 que $A(T, \omega, \delta) = H^{\top}(T)\tilde{A}(T, \omega, \delta)F^{\top}(T, \omega, \delta) + O\left(\frac{1}{T}\right)$, basta mostrarmos que $H^{\top}(T) = \tilde{A}(T, \omega, \delta) = I$.

De fato, por definição temos que $\dot{\phi}(t) = k(t)a(t) = -k(t)\cos\left(\frac{2\pi}{T}t\right)$ e $\phi(0) = 0$. Logo, pelo Teorema Fundamental do Cálculo:

$$\phi(T) = \phi(T) - \phi(0) = \int_0^T \dot{\phi}(t)dt = -\int_0^T k(t)\phi(t)dt = -\frac{T}{2\pi} \left(\left[k(t)\sin\left(\frac{2\pi}{T}t\right) \right]_0^{T/2} - \left[k(t)\sin\left(\frac{2\pi}{T}t\right) \right]_{T/2}^T \right) = 0$$

Logo, usando a definição de *H*, teremos que

$$H^{\top}(T) = \begin{bmatrix} \cos(0) & -\sin(0) & 0\\ \sin(0) & \cos(0) & 0\\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = I.$$

Agora, como b(T) = 0, $\alpha(T, \omega, \delta) = |h(T, \omega) - a(T)| e a(T) = -1 \Rightarrow h(T, \omega) - a(T) > 0$ (já que $|h(t, \omega)| < 1$), temos que

$$\tilde{A}(T,\omega,\delta) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{h(T,\omega) - a(T)}{|h(T,\omega) - a(T)|} & \delta b(T) \\ 0 & -\delta b(T) & \frac{h(T,\omega) - a(T)}{|h(T,\omega) - a(T)|} \end{bmatrix} = I. \blacksquare$$

PROPOSIÇÃO 11. *Quando* $k(t) = \kappa > 0$ *para* $t \in [0, T/2[e \ k(t) = -\kappa < 0$ *para* $t \in [T/2, T]$, *então*

$$A(T,\omega,\delta) = I + O\left(\frac{1}{T}\right)$$

Demonstração: Pela proposição 10, basta mostrarmos que, para o caso ímpar, $F^{\top}(T, \omega, \delta) = I$ para todo $\omega \in [\omega_{\star}, \omega^{\star}]$ e para todo $\delta \in]0, 1].$ Mas $\gamma(T, \omega, \delta) = \int_0^{T/2} k(t) \alpha(t, \omega, \delta) dt + \int_{T/2}^T k(t) \alpha(t, \omega, \delta) dt = \kappa \int_0^{T/2} \alpha(t, \omega, \delta) dt - \kappa \int_{T/2}^T \alpha(t, \omega, \delta) dt = 0$ pela simetria de α . Assim,

$$F^{\top}(t,\omega,\delta) = \begin{vmatrix} \cos(0) & \sin(0) & 0 \\ -\sin(0) & \cos(0) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} = I. \blacksquare$$

PROPOSIÇÃO 12. *Quando* $k(t) = \kappa > 0$ *para* $t \in [0, T/2[e k(t) = -\kappa - \Delta < 0$ *para* $t \in [T/2, T]$ (*caso desbalanceado*), *onde* $\kappa >> \Delta > 0$, *então, além do enunciado para o teorema do caso constante, vale também que*

$$|\gamma_0 - \gamma(T, \omega, \delta)| \le (1 - \delta_\star)|\gamma_0| + \frac{T\omega^\star}{2|k|} + O\left(\frac{1}{k}\right)$$
(4.18)

onde $\gamma_0 = -\Delta \int_0^{T/2} \sqrt{a^2 + b^2} dt \ e \ \delta_{\star} = \min\{\delta \mid \delta \in]0, 1]\}.$

Demonstração: Considere $\gamma(T, \omega, \delta) = \gamma_T(\omega, \delta) = -\Delta \int_0^{T/2} \sqrt{\left(\frac{\omega}{k} - a\right)^2 + \delta^2 b^2}$ e vamos expandir em série de Taylor em torno do ponto $(\omega, \delta) = (0, 1)$.

Temos assim

$$\gamma_T(\omega,\delta) = \gamma_0 + \frac{\partial\gamma_T}{\partial\omega}(0,1)\omega + \frac{\gamma_T}{\partial\delta}(0,1)(\delta-1) + O\left(\frac{1}{k}\right)$$

o que implica que

$$|\gamma_0 - \gamma_T(\omega, \delta)| \le \left| -\frac{\partial \gamma_T}{\partial \omega}(0, 1) \right| \omega^* + (1 - \delta_*) \left| \frac{\gamma_T}{\partial \delta}(0, 1) \right| + O\left(\frac{1}{k}\right)$$

Calculando as derivadas de primeira ordem, teremos

$$\frac{\partial \gamma_T}{\partial \omega}(\omega,\delta) = -\Delta \int_0^{T/2} \frac{\left(\frac{\omega}{k} - a\right)}{k\sqrt{\left(\frac{\omega}{k} - a\right)^2 + \delta^2 b^2}} dt$$
$$\frac{\partial \gamma_T}{\partial \delta}(\omega,\delta) = -\Delta \int_0^{T/2} \frac{b^2 \delta}{\sqrt{\left(\frac{\omega}{k} - a\right)^2 + \delta^2 b^2}} dt$$

Calculando em (0, 1), teremos:

$$\frac{\partial \gamma_T}{\partial \omega}(0,1) = \frac{\Delta}{k} \int_0^{T/2} \frac{a}{\sqrt{a^2 + b^2}} dt$$
$$\frac{\partial \gamma_T}{\partial \delta}(0,1) = \Delta \int_0^{T/2} \frac{b^2}{\sqrt{a^2 + b^2}} dt$$

Das desigualdades

$$\frac{a}{\sqrt{a^2 + b^2}} \le 1$$
, $\frac{b}{\sqrt{a^2 + b^2}} \le 1$ e $b \le \sqrt{a^2 + b^2}$

seque que

$$\left|\frac{\partial \gamma_T}{\partial \omega}(0,1)\right| \le \frac{T}{2|k|} \quad \text{e} \quad \left|\frac{\partial \gamma_T}{\partial \delta}(0,1)\right| \le |\gamma_0|$$

o que demonstra a desigualdade que queríamos.

PROPOSIÇÃO 13. Para uma escolha conveniente de κ e Δ , constantes de k = k(t) no caso desbalanceado, é possivel fazer com que $-\pi < \gamma(T, \omega, \delta) < 0$.

Demonstração: Seja γ_0 definido como na proposição 12. Como $\Delta > 0$, teremos da definição que $\gamma_0, \gamma(T, \omega, \delta) < 0$ e, assim, $|\gamma_0| = -\gamma_0$. Logo, do resultado da proposição 12 segue que

$$(2-\delta_{\star})\gamma_0 - \frac{\Delta T \omega^{\star 2}}{2|k|} - \langle \gamma(T,\omega,\delta) \langle 0 \text{ onde} = O\left(\frac{1}{k}\right)$$

Para conseguirmos o resultado almejado, basta mostrar então que

$$-\pi < (2 - \delta_{\star})\gamma_0 - \frac{\Delta T \omega^{\star 2}}{2|k|} - \Longleftrightarrow (2 - \delta_{\star})|\gamma_0| + \frac{\Delta T \omega^{\star 2}}{2|k|} + < \pi$$

Das definições de *a* e *b* temos que $|\gamma_0| < \Delta T$. Além disso, podemos tomar |k| suficientemente grande de tal forma que $\frac{T\omega^*}{2|k|} + < \frac{\delta_*\pi}{3}$.

Esolhendo então $\Delta = \frac{\pi}{3T}$, teremos

$$(2-\delta_{\star})|\gamma_0| + \frac{\Delta T \omega^{\star 2}}{2|k|} + < (2-\delta_{\star})\Delta T + \frac{\delta_{\star}\pi}{3} = (2-\delta_{\star})\frac{\pi}{3T}T + \frac{\delta_{\star}\pi}{3} = \frac{2\pi}{3} < \pi$$

como queríamos demonstrar.

DEMONSTRAÇÃO DO TEOREMA 4: Definindo $\bar{u} \in \bar{v}$ como em (3.2) e (3.3) e k = k(t) como no caso desbalanceado, construímos o propagador adiabático $A = A(t, \omega, \delta)$ que satisfaz a equação (3.9). Considerando $A(T, \omega, \delta)$, que é a imagem do propagador no instante t = T, para cada par (ω, δ) admissível, existe um ângulo de Euler $\Phi(\omega, \delta)$.

Além disso, para *T* suficientemente grande, podemos garantir que $A(T, \omega, \delta) = F^{\top}(T, \omega, \delta) + O\left(\frac{1}{T}\right) \neq I$, o que implica que também existem um eixo de Euler $e(\omega, \delta)$ (devido à observação presente na seção (2.4), o eixo de Euler não é único).

De (2.15), temos que $\cos(\Phi(\omega,\delta)) = \frac{\operatorname{tr}(A) - 1}{2} = \frac{2\cos(\gamma(T,\omega,\delta)) + 1 + \epsilon_1 - 1}{2} = \cos(\gamma(T,\omega,\delta)) + \epsilon_2$, onde $\epsilon_2 = O\left(\frac{1}{T}\right)$.

Sabemos que o ângulo de Euler é definido, para se evitar ambiguidades desnecessárias, como dentro do intervalo $[-\pi,\pi]$. Ajustando os parâmteros κ e Δ , como na proposição 13, para que $-\pi < \gamma(T, \omega, \delta) < 0$, teremos que $\gamma(T, \omega, \delta) = \Phi(\omega, \delta) + \epsilon_3$ ou $\gamma(T, \omega, \delta) = -\Phi(\omega, \delta) + \epsilon_3$, onde $\epsilon_3 = O\left(\frac{1}{T}\right)$. Em qualquer caso, teremos $|\Phi(\omega, \delta) - \gamma(T, \omega, \delta)| \le \epsilon_3$.

De (2.16), teremos que o eixo de Euler será dado por

$$e(\omega, \delta) = \left[0, 0, \frac{\sin(\gamma(T, \omega, \delta)) + \epsilon_4}{\sin(\Phi)}\right]^{\top}$$
onde $\epsilon_4 = O\left(\frac{1}{T}\right)$.

Da continuidade do seno, $\sin(\gamma(T, \omega, \delta)) = \sin(\Phi(\omega, \delta)) + \epsilon_5$, onde $\epsilon_5 = O\left(\frac{1}{T}\right)$. Além disso, pelo Teorema 3:

$$A(T,\omega,\delta)(-e_3) = H^{\top}(T)\tilde{A}(T,\omega,\delta)F^{\top}(T,\omega,\delta)(-e_3) + O\left(\frac{1}{T}\right) = -e_3 + \epsilon_6$$

Logo, seja $\epsilon > 0$, podemos aumentar *T* se necessário (e, consequentemente, reajustando κ e Δ na proposição 13) para que $|\epsilon_5| + |\epsilon_4| < \epsilon$ e $|\epsilon_6| < \epsilon$. Teremos assim $||e(\omega, \delta) - (-e_3)|| < \epsilon$ e $||A(T, \omega, \delta)(-e_3) - (-e_3)|| < \epsilon$.

DEMONSTRAÇÃO DO TEOREMA 5: Notemos que para cada ω admissível fixado, temos que (3.9) é um sistema linear não autônomo cuja condição inicial é a matriz identidade. Logo, $A(nT, \omega, \delta) = A^n(T, \omega, \delta)$. Ainda, das propriedades de SO(3) e do eixo de Euler, temos que $e(\omega, \delta)$ é um autovetor de $A(T, \omega, \delta)$ associado ao autovalor +1. Logo, também é um autovetor de $A^n(T, \omega, \delta)$ associado ao autovalor +1. Portanto $||A^n(T, \omega, \delta)(-e_3) - e(\omega, \delta)|| < \epsilon$. Logo, temos

$$\left\|A^{n}(T,\omega,\delta)(-e_{3})-(-e_{3})\right\| \leq \left\|A^{n}(T,\omega,\delta)(-e_{3})-e(\omega,\delta)\right\| + \left\|e(\omega,\delta)-(-e_{3})\right\| < 2\epsilon$$

5 ANÁLISE DE SENSIBILIDADE AOS PARÂMETROS

Iremos fazer uma análise nesse cápítulo sobre a sensibilidade do sistema aos diversos parâmetros envolvidos, além de ratificar os resultados teóricos obtidos nas proposições e teoremas que permeiam esse trabalho. Para isso, utilizaremos simulações em MATLAB e Simulink, que utilizam a ferramenta de integração numérica ODE45.

Denotaremos por $M(t, \omega, \delta) = (M_1(t, \omega, \delta), M_2(t, \omega, \delta), M_3(t, \omega, \delta))^{\top}$ o vetor de magnetização que é solução da equação de Bloch e por $M_{av}(t, \omega, \delta) = (M_{av1}(t, \omega, \delta), M_{av2}(t, \omega, \delta), M_{av3}(t, \omega, \delta))^{\top}$ a trajetória aproximada do sistema original obtida a partir da medianização.

Na grande maioria das vezes, iremos simular a variação dos parâmetros $\omega e \delta$ para os casos constante e ímpar da função k = k(t) e faremos uma comparação entre os dois. Incluiremos simulações do terceiro caso, desbalanceado, somente nas seções referentes ao eixo de Euler e ao erro por medianização, únicos casos onde seu comportamento difere significativamente do caso ímpar.

Como estamos interessados no comportamento do sistema quando o mesmo realiza n ciclos, fixamos na maioria de nossas simulações n = 5, pois consideramos que esse valor é razoável para se ter uma ideia do comportamento adquirido pelo sistema e que um *n* muito grande comprometeria a visualização das figuras.

Outra consideração a se fazer é a de que, também na grande maioria dos casos, simulamos e analisamos somente o comportamento da componente M_3 do vetor de magnetização. Isso deve-se ao fato de, ao realizarmos um teste sobre o vetor de magnetização M para sabermos se está sobre $+e_3$ ou $-e_3$, somente essa componente influenciará na probabilidade da obtenção dos resultados. Em todos os casos nos quais tal análise se fizer presente, fixaremos o elemento do *ensemble* com os parâmetros $\omega = 0$ e $\delta = 1$, por serem esses ideais¹. Também por questão de visualização das figuras e de sensibilidade do algoritmo de integração numérica utilizada no ODE45, fixamos a magnitude da função k como $\kappa = 1$, excetuando-se o caso onde os efeitos da variação de κ também será analisado.

Nas simulações da componente M_3 espera-se que, dado $M(0,\omega,\delta) = -e_3$, devemos ter $M_3(0,\omega,\delta) = -1$, $M_3\left(\frac{T}{2},\omega,\delta\right)$ próximo de 1 (o que significaria $M\left(\frac{T}{2},\omega,\delta\right)$ próximo de $+e_3$) e $M_3(T,\omega,\delta)$ próximo de -1 (o que significaria $M(T,\omega,\delta)$ próximo de $-e_3$). Para os próximas iterações, desejamos que se repita o comportamento do primeiro ciclo.

5.1 Variação do período T

Simulamos a componente $M_3(t, \omega, \delta)$ utilizando os valores T = 1, 10, 100 para os casos constante e ímpar, com $\omega = 0$, $\delta = 1$ e $\kappa = 1$. Em vários momentos de nossas demonstrações utilizamos o argumento de T poder ser tomado suficientemente grande, o que torna nosso resultado matematicamente correto mas levanta questões de ordem prática, tais como: quanto seria esse valor suficientemente grande? Justamente por isso as simulações desempenham um papel fundamental na área de Matemática

¹O fato de $\omega = 0$ e $\delta = 1$ serem valores ideais (sistema sem dispersão) pode ser encontrado em [8].

Aplicada à Engenharia, pois nos dá uma ideia quantitativa de argumentos de cunho puramente lógico.

Na figura 16, que contempla o caso constante, vemos que para T = 1 não conseguimos realizar os ciclos da forma que desejamos e a trajetória de M_3 está completamente desfigurada. Uma explicação seria a de que, para um período muito baixo, a frequência dos controles é muito baixa e os mesmos não teriam energia suficiente para fazer M_3 oscilar. Para um período dez vezes maior (T = 10 s), a trajetória de M_3 já começa a adquitir um comportamento próximo do desejado. Finalmente, para T = 100 s, temos que M_3 oscila da maneira que desejamos. Para valores superiores a 100, nossas simulações mostraram (não são apresentadas aqui para não "poluir"a figura) que a trajetória apresenta pouca alteração e praticamente se sobrepõe ao que temos para T = 100 s.



Figura 16: Comportamento da componente M_3 conforme o aumento do período T no caso constante.

Quando tomamos o caso ímpar, mostrado na figura 17, já começamos a perceber o porquê desse caso ser, pelo menos quanto ao comportamento em módulo, melhor que o caso constante. Vejamos que mesmo com pouca energia nos controles devido à baixa frequência, a trajetória de M_3 não é desfigurada e apresenta um comportamento periódico. Nos demais casos, para T = 10 s temos uma melhoria significativa da trajetória e para T = 100 s a mesma adquire o comportamento desejado.



Figura 17: Comportamento da componente M_3 conforme o aumento do período T no caso ímpar.

Vemos portanto que, para valores altos do período T, mesmo distante do ideal, o comportamento da trajetória de M_3 no caso ímpar é melhor que o caso constante, pois apresenta maior regularidade inclusive quando comparamos as iterações entre si, algo que só ocorre no caso constante para valores altos de T.
5.2 Variação da frequência de Larmor ω

Embora nas simulações da seção anterior o comportamento de M_3 seja o que pretendemos para valores altos de T, não devemos esquecer que tomamos um elemento do *ensemble* com parâmetros ideais. Para outros parâmetros a trajetória de M_3 poderá, a priori, sofrer alterações significativas.

Como fixamos $\kappa = 1$, a variação de ω , pelas condições impostas sobre esse parâmetro na seção 3.1, deverá ser $-1 < \omega < 1$, já que $|k(t)| > \omega^*$ para todo $t \in [0, T]$. Notamos nas simulações realizadas que, para $|\omega| < 0.5$ temos grande robustez das trajetórias de M_3 nos dois casos (constante e ímpar) conforme mostram as figuras 18 e 19.



Figura 18: Variação da componente M_3 para diferentes valores de ω no caso constante.

Quando aumentamos o valor absoluto de ω para um valor maior ou igual a 0.5, entretanto, a trajetória de M_3 se afasta afasta bastante da ideal tanto no caso constante (figura 20) quanto no caso ímpar (figura 21).



Figura 19: Variação da componente M_3 para diferentes valores de ω no caso ímpar.



Figura 20: Variação da componente M_3 para $\omega = 0.5$ e T = 100s no caso constante.



Figura 21: Variação da componente M_3 para $\omega = 0.5$ e T = 100s no caso ímpar.

Em nossas demonstrações tomamos os valores e κ e T grandes. Vejamos como isso pode "corrigir"as distorções provocadas por um valor maior de ω .

Ao aumentarmos o valor do período para T = 1000 s, vemos que no caso constante a componente M_3 começa a adquirir a forma desejada (figura 22) enquanto no caso ímpar (figura 23) essa correção é bem mais acentuada.

Ao fazermos $\kappa = 10$ e mantermos o período com o valor original T = 100 s, vemos que no caso constante a componente M_3 não possui um comportamento satisfatório (figura 24), enquanto que no caso ímpar ela possui uma trajetória excelente (figura 25).



Figura 22: Variação da componente M_3 para $\omega = 0.5$ e T = 1000s no caso constante.



Figura 23: Variação da componente M_3 para $\omega = 0.5$ r T = 1000s no caso ímpar.



Figura 24: Variação da componente M_3 para $\omega = 0.5$ e $\kappa = 5$ no caso constante.



Figura 25: Variação da componente M_3 para $\omega = 0.5$ e $\kappa = 5$ no caso ímpar.

5.3 Variação da inomogeneidade em radiofrequência δ

Vamos agora variar o parâmetro δ e analisar sua influência sobre a componente M_3 do sistema. Lembrando que $0 \le \delta \le 1$, variamos primeiramente seu valor entre 0.4 e 1.0. Para esse intervalo de valores os dois casos comportam-se bem (figuras 26 e 27).



Figura 26: Variação da componente M_3 para diversos valores de δ no caso constante.

Já para valores baixos de δ vemos uma clara vantagem de robustez do caso ímpar sobre o caso constante. Entretanto, se em termos matemáticos isso seria interessante, na prática o valor de δ costuma ficar bastante próximo a 1 [8], o que torna os gráficos 28 e 29 apenas uma curiosidade.

5.4 Erro por medianização

Nesta seção vamos examinar o erro cometido quando aproximamos o sistema utilizando o método da medianização (*averaging*). O nosso erro é uma função



Figura 27: Variação da componente M_3 para diversos valores de δ no caso ímpar.



Figura 28: Variação da componente M_3 para valores baixos de δ no caso constante.



Figura 29: Variação da componente M_3 para valores baixos de δ no caso ímpar.

 $E: X \longrightarrow \mathbb{R}$ definida por $E(t, \omega, \delta) = ||M(t, \omega, \delta) - M_{av}(t, \omega, \delta)||.$

É muito importante notar que aqui, pela primeira vez nesse capítulo, estamos querendo analisar se a trajetória de M e de M_{av} são semelhantes, isto é, se temos um verdadeiro rastreamento como sugere o título do trabalho. Isso evidentemente só ocorre se os valores de E forem próximos de zero (ou seja, as **três** coordenadas dos vetores estão próximas).

Fixando T = 1000 s (portanto, um período mais alto), $\kappa = 1$, $\Delta = 0.01$, n = 5, $\omega = 0.8$ e $\delta = 0.5$ (simularemos para um caso extremo) vemos claramente (figura 30) que o caso desbalanceado comporta-se muito mais próximo que o caso ímpar (figura 29).

Aliás, vale ressaltar dois aspectos matemáticos que são evidentes no resultado de



Figura 30: Comparação do erro por medianianização nos três casos. Quando aumentamos o número de iterações, somente no caso desbalanceado o erro é assintoticamente estável.

nossa simulação numérica. O primeiro é que a única diferença do caso desbalanceado para o caso ímpar é que a cada meio período, um possui $\kappa = -1.01$ e o outro $\kappa = -1$, isto é, simplesmente eliminando a singularidade que existia para o eixo de Euler obtivemos um resultado incrivelmente melhor!

O segundo, e que ficará visualmente mais claro na figura 31 (onde simulamos 15 iterações e T = 1000 s, porém sem dispersão para $\omega e \delta$), é que o erro ao final de cada iteração, para as iterações sucessivas, nunca ultrapassa o dobro do erro cometido na primeira iteração. No caso dessa simulação numérica, temos que o erro da primeira iteração é $\epsilon = 1.1 \times 10^{-4}$ e o erro máximo cometido para cada uma das 15 iterações realizadas foi de 1.5×10^{-4} .

Na figura 32 exibimos, para efeito de comparação, o erro cometido ao final de cada



Figura 31: No caso desbalanceado, o erro por medianização após n iterações nunca ultrapassa o dobro do erro cometido na primeira iteração. No caso ímpar o erro é estritamente crescente.

iteração para o caso ímpar. Embora o erro da primeira iteração seja de 1.5×10^{-6} (bem mais baixo que no caso desbalanceado), ele é sempre crescente, chegando a 1.7×10^{-5} (mais de dez vezes o primeiro) ao final da última iteração. Vale ressaltar que o fato do caso ímpar ter resultado, na figura 32, num erro menor que o desbalanceado (apesar de o mesmo não ser estável) deve-se ao fato de termos simulado o erro por medianização sem dispersões de ω e δ (isto é, utilizamos os valores ideais $\omega = 0$ e $\delta = 1$).



Figura 32: Apesar de conseguirmos reduzir o erro por medizanização a valores baixos no caso ímpar, o mesmo é estritamente crescente.

6 CONCLUSÕES

Nesse trabalho abordamos uma generalização do problema de inversão do spin, etapa importante da ressonância nuclear magnética. Dado um *ensemble*, cuja dinâmica de sua magnetização é regida por (3.1) (equações de Bloch), mostramos que é possível encontrar uma função de entrada apropriada (a mesma para todos os elementos do ensemble), definida como em (3.2)-(3.6), de forma que após n ciclos dentro da esfera unitária, a posição do vetor de magnetização fica muito próxima da posição inicial.

Embora esse problema já tenha sido abordado e resolvido matematicamente em [3], essa foi a primeira vez que se utilizou controles de norma limitada, o que faz com que nossa solução tenha uma utilidade prática importante. Embora tais controles não sejam únicos, procuramos dar uma heurística da forma com que eles foram por nós inferidos, seja através de discussões matemáticas, seja por citações de referências bibliográficas.

Para a demonstração matemática de nosso resultado, utilizamos uma caracterização aproximada do operador que descreve a dinâmica do sistema (propagador) através do método assintótico da medianização, onde substituímos o sistema original variante no tempo (não autônomo) por um invariante no tempo (autônomo e, portanto, mais simples), com um comportamento médio, e depois provamos que a solução do sistema aproximado converge para a solução do sistema original quando fazemos o mesmo variar lentamente. Encerramos o trabalho com diversas simulações numéricas, onde analisamos a robustez do sistema às variações dos parâmetros de dispersão e estimamos valores aceitáveis para alguns dos parâmetros envolvidos (aqueles que nas demonstrações matemáticas tomamos grande ou pequeno o suficiente). Além disso, tais simulações comprovaram as previsões teóricas sobre qual deve ser nossa escolha adequada um dos parâmetros de nossos controles.

Para trabalhos futuros pretendemos abordar o problema de definir uma de norma limitada que possibilitem conduzir os elementos do *ensemble*, partindo de condições iniciais eventualmente distintas, ao mesmo estado final ou então conduzir todos os elementos do *ensemble* de uma mesma condição inicial à estados distintos prédeterminados (sempre com uma mesma lei de controle).

REFERÊNCIAS

- [1] B. Amaral, A. T. Baraviera, and M. O. T. Cunha. *Mecânica Quântica para Matemáticos em Formação*. IMPA, Rio de janeiro, 2011.
- [2] J. Baumeister and A. Leitao. Introdução à Teoria de Controle e Programação Dinâmica. IMPA, Rio de Janeiro, 2008.
- [3] K. Beauchard, P. S. Pereira da Silva, and P. Rouchon. Stabilization of an arbitrary profile for an ensemble of half-spin systems. *Automatica*, 49(3):2133–2137, 2013.
- [4] S. Cong. Control of Quantum Systems: Theory and Methods. Wiley, Singapore, 2004.
- [5] P. S. Pereira da Silva and U. A. Maciel Neto. Controle adiabático de ensembles quânticos via método das médias. *Anais do XX Congresso Brasileiro de Automática*, 1:1–8, 2014.
- [6] D. D'Alessandro. *Introduction to Quantum Control and Dynamics*. Chapman Hall/CRC, Boca Raton. FL, 2008.
- [7] D. Dong and I. R. Petersen. Quantum control theory and applications: A survey. *IET Control Theory Applications*, 4(12):2651–2671, 2010.
- [8] J. J. Gorman and B. Shapiro. *Feedback Control of MEMs to atoms*. Springer, New York, 2012.
- [9] A. P. Guimaraes and I. S. Oliveira. *Magnetismo e Ressonância Magnética em Sólidos*. EDUSP, Rio de janeiro, 2009.
- [10] D. Halliday, J. Walter, and R. Resnick. Fundamentos de Física 3: Eletromagnetismo - 9.ed. LTC, Rio de Janeiro, 2012.
- [11] D. Halliday, J. Walter, and R. Resnick. Fundamentos de Física 4: Óptica e Física Moderna - 9.ed. LTC, Rio de Janeiro, 2012.
- [12] P. C. Hughes. Spacecraft Attitude Dynamics. John Wiley Sons, New York, 1986.
- [13] H. K. Khalil. *Nonlinear Systems 3.ed*. Prentice Hall, Michigan, 2002.
- [14] N. Khaneja, R. Brockett, and S. Glaser. Time optimal control of spin systems. *Physical Review A*, 63(3), 2001.
- [15] Z. Leghtas. *Préparation et stabilisation de systèmes quantiques*. Doutorado, École nationale supérieure des Mines de Paris, 2012.

- [16] J. S. Li. Control of Inhomogeneous Ensembles. Doutorado, Harvard, 2006.
- [17] J. S. Li and N. Khaneja. Ensemble controllability of the bloch equations. *Proce-edings of the 45th IEEE Conference on Decision and Control*, pages 2483–2487, 2006.
- [18] E. L. Lima. Curso de Análise vol.2 1.ed. IMPA, Rio de Janeiro, 1981.
- [19] J. R. P. Mahon. *Mecânica Quântica: desenvolvimento contemporâneo e aplicações - 1.ed.* LTC, Rio de Janeiro, 2011.
- [20] J. A. Sanders, F. Verhulst, and J. Murdock. *Averaging Methods in Nonlinear Dynamical Systems 2.ed.* Springer, New York, 2000.