Résolution d'équations différentielles à l'aide de réseaux de neurones

Matthieu Carreau, encadré par Stam Nicolis et Pascal Thibaudeau Juillet 2022

1 Présentations de différentes approches pour la résolution d'une équation différentielle d'ordre 1

On cherche à tester nos méthodes sur l'équation différentielle suivante, pour $x \in [0,1]$:

$$\begin{cases} \frac{d\Psi}{dx} + \cos(2\pi x) = 0\\ \Psi(0) = A \end{cases} \tag{1}$$

Cette équation avec condition initiale admet une unique solution analytique :

$$\Psi(x) = A - \frac{1}{2\pi} \sin(2\pi x) \tag{2}$$

1.1 Recherche de solutions en série de Fourier

On cherche des solutions numériques approchées sous la forme de séries de Fourier tronquées avec M harmoniques :

$$\begin{cases} \tilde{\Psi}(x) = A + \mathcal{N}(x, P) \\ \mathcal{N}(x, P) = \sum_{m=1}^{M} A_m sin(2\pi m x) \end{cases}$$
 (3)

P représente les coefficients $(A_m)_{m \in [\![1,M]\!]}$ qui sont les paramètres à ajuster. On cherche à obtenir la solution analytique, i.e $\forall m \in [\![1,M]\!], A_m = -\frac{1}{2\pi}\delta_1^m$.

On définit une fonction d'erreur pour ces solutions potentielles, en s'interressant aux N points suivants : $\forall i \in [\![1,N]\!], x_i = \frac{i}{N-1}$

$$E = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \left(\sum_{m=1}^{M} 2\pi m A_m \cos(2\pi m x_i) + \cos(2\pi x_i) \right)^2$$
 (4)

On calcule alors la dérivée partielle de cette erreur par rapport à chaque paramètre ${\cal A}_l$:

$$\frac{\partial E}{\partial A_l} = \sum_{i=1}^{N} \left(\sum_{m=1}^{M} 2\pi m A_m \cos(2\pi m x_i) + \cos(2\pi x_i)\right) 2\pi l \cos(2\pi l x_i) \tag{5}$$

Les deux méthodes suivantes ont pour objectif de trouver les coefficient $(A_m)_{m\in \llbracket 1,M\rrbracket}$ qui minimisent E.

1.1.1 Première méthode : inversion d'un système linéaire

On cherche à résoudre le système linéaire donné par : $\forall m \in [1, M], \frac{\partial E}{\partial A_l} = 0$, on définit pour cela les matrices suivantes :

$$\mathcal{M} = (r_{m,l})_{(m,l) \in \llbracket 1,M \rrbracket^2}, \vec{A} = \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ \vdots \\ A_M \end{pmatrix}, \vec{b} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_M \end{pmatrix}$$

$$(6)$$

$$\forall (m,l) \in [1,N]^2, \begin{cases} r_{m,l} = 2\pi m l \sum_{i=1}^{N} \cos(2\pi m x_i) \cos(2\pi l x_i) \\ b_l = -l \sum_{i=1}^{N} \cos(2\pi x_i) \cos(2\pi l x_i) \end{cases}$$
(7)

On résoud le système en écrivant l'équation matricielle le représentant :

$$\mathcal{M}\vec{A} = \vec{b} \Leftrightarrow \vec{A} = \mathcal{M}^{-1}\vec{b} \tag{8}$$

(Attention pour certains paramètres comme (M=5, N=10), \mathcal{M} n'est pas inversible).

On initialise l'algorithme avec les paramètres suivants : (M=10, N=100) On obtient les résultats suivants :

 $\begin{array}{lll} A &=& [-1.59154943e - 01, 4.74338450e - 19, 1.08420217e - 19, 2.71050543e - 20, 2.74438675e - 19, 1.05032085e - 19, 9.82558219e - 20, 5.92923063e - 20, 5.42101086e - 20, 5.42101086e - 20] \end{array}$

On constate comme attendu que le coefficient A_1 est très proche de $-\frac{1}{2\pi}$ (erreur relative de l'ordre de 10^{-16}), et que les autres coefficients ont une valeur absolue maximale de 1.1510^{-17} . On peut donc valider notre modèle.

1.1.2 Seconde méthode : descente de gradient

On définit les paramètres suivants :

$$\alpha > 0, \vec{A}^{(0)} = \begin{pmatrix} A_1^{(0)} \\ A_2^{(0)} \\ \vdots \\ A_M^{(0)} \end{pmatrix}, \vec{g}^{(0)} = \begin{pmatrix} \frac{\partial E^{(0)}}{\partial A_2^{(0)}} \\ \frac{\partial E^{(0)}}{\partial A_2^{(0)}} \\ \vdots \\ \frac{\partial E^{(0)}}{\partial A_M^{(0)}} \end{pmatrix}, \tag{9}$$

Puis on calcule itérativement :

$$\vec{A}^{(k+1)} = \vec{A}^{(k)} - \alpha \vec{g}^{(k)} \tag{10}$$

On initialise l'algorithme avec les paramètres suivants : $(M=10,N=100,V_0=1,\alpha=10^{-5})$ On obtient au bout de 10000 itérations les résultats suivants :

 $A = \begin{bmatrix} -1.59154943e - 01, 1.15066541e - 17, 7.99406786e - 18, 5.64963221e - 18, 4.88181580e - 18, 3.85811144e - 18, 3.46024465e - 18, 2.88560910e - 18, 2.81846501e - 18, 2.43172156e - 18 \end{bmatrix}$

On constate comme attendu que le coefficient A_1 est très proche de $-\frac{1}{2\pi}$ (erreur relative de l'ordre de 10^{-15}), et que les autres coefficients ont une valeur absolue maximale de 1.1510^{-17} . On peut donc valider notre modèle.

1.2 Recherche de solutions à l'aide d'un réseau de neurones

On cherche à présent à utiliser un réseau de neurones pour approcher la solution de l'équation différentielle. On cherche désormais des solutions approchées sous la forme suivante :

$$\begin{cases}
\tilde{\Psi}(x) = A + \mathcal{N}(x, P) \\
\mathcal{N}(x, P) = \sum_{j=1}^{H} v_j \sigma(w_j x + b_j)
\end{cases}$$
(11)

 $\mathcal{N}(x,P)$ correspond donc à la sortie d'un réseau de neurones dont l'architecture est présentée en figure 1, contenant une couche cachée intermèdiaire, qui réalise en sortie une somme pondérée de sigmoïdes, la fonction utilisée est $\forall x \in \mathbf{R}, \sigma(x) = \frac{1}{1+e^{-x}}$. Les paramètres P à ajuster sont désormais les coefficients $(w_j)_{j \in [\![1,H]\!]}, (b_j)_{j \in [\![1,H]\!]}$ et $(v_j)_{j \in [\![1,H]\!]}$.

On définit une nouvelle fonction d'erreur, calculée à partir des mêmes N points que précédemment : $\forall i \in [\![1,N]\!], x_i = \frac{i}{N-1}$

$$E(P) = \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{d\tilde{\Psi}}{dx}(x_i) + \cos(2\pi x)\right)^2$$
 (12)

On calcule ensuite les expressions analytiques des dérivées partielles de E(P) par rapport à chaque paramètre ajustable, puis on cherche à minimiser cette erreur à l'aide de l'algorithme de descente de gradients.

1.2.1 Résultats obtenus

On initialise l'algorithme avec les paramètres suivants : (H=4,N=20) On obtient une erreur de $1,2.10^{-2}$ et une estimation visible en figure 2. Cela permet de valider notre modèle sur l'étude à une dimension.

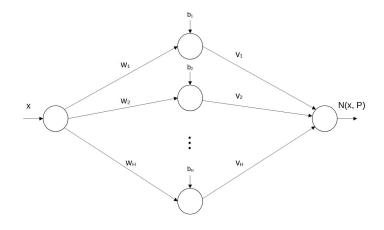


FIGURE 1 – Réseau de neurones

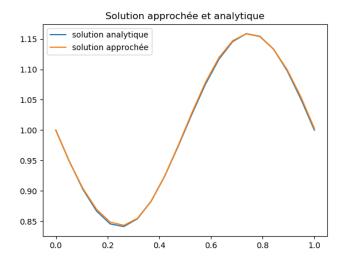


FIGURE 2 – estimation de la solution par un réseau de neurones

2 Etude du cas de deux équations d'ordre 1 couplées, représentant un mouvement de précession

On s'intéresse désormais au problème de la précession d'un moment magnétique dans un champ magnétique constant. On le modélise par les équations suivantes pour $t \in [0,1]$:

$$\begin{cases}
\frac{dv_x}{dt} = \omega v_y \\ \frac{dv_y}{dt} = -\omega v_x
\end{cases}
\begin{cases}
v_x(0) = V_0 \\ v_y(0) = 0
\end{cases}$$
(13)

Ce problème admet une unique solution analytique :

$$\begin{cases} v_x(t) = V_0 cos(2\omega t) \\ v_y(t) = -V_0 sin(2\omega t) \end{cases}$$
(14)

2.1 Recherche des solutions en séries de Fourier

On cherche des solutions numériques approchées sous la forme de séries de Fourier tronquées avec M harmoniques, en posant la forme suivante :

$$\begin{cases} \tilde{v}_x(t) = V_0 + \sum_{m=1}^M A_m(\cos(\omega m t) - 1) + B_m \sin(\omega m t) \\ \tilde{v}_y(t) = \sum_{m=1}^M -A_m \sin(\omega m t) + B_m(\cos(\omega m t) - 1) \end{cases}$$
(15)

Les coefficients $(A_m)_{m \in \llbracket 1,M \rrbracket}$ et $(B_m)_{m \in \llbracket 0,M \rrbracket}$ sont les paramètres à ajuster. On cherche à obtenir la solution analytique, i.e $\forall m \in \llbracket 0,M \rrbracket, A_m = \delta_1^m$ et $\forall m \in \llbracket 1,M \rrbracket, B_m = 0$. On remarque que le coefficient A_0 n'a aucune influence.

On définit une fonction d'erreur pour ces solutions potentielles, en s'interressant aux N points suivants : $\forall i \in [\![1,N]\!], t_i = \frac{i}{N-1}$:

$$E(P) = \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{d\tilde{v}_x}{dt}(t_i) - \omega \tilde{v}_y(t_i)\right)^2 + \left(\frac{d\tilde{v}_y}{dt}(t_i) + \omega \tilde{v}_x(t_i)\right)^2$$
(16)

On utilise ensuite la méthode de descente de gradients définie précédemment, en calculant les dérivées partielles suivantes : $(\frac{\partial E}{\partial A_l}, \frac{\partial E}{\partial B_l})_{l \in [\![1,M]\!]}$

2.1.1 Résultats obtenus

On initialise l'algorithme avec les paramètres suivants : $(M=10,N=100,V_0=1,\omega=2\pi,\alpha=10^{-6})$ On obtient au bout de 10000 itérations les résultats suivants :

08, -1.09721848e - 08, -8.43076573e - 09]

08, 1.27429827e - 08, 7.90013061e - 09, 5.32980412e - 09, 3.80797092e - 09, 2.83579070e - 09, 2.17895410e - 09]

On constate comme attendu que le coefficient A_0 est très proche de 1 (erreur

relative inférieure de 2.5510^{-6}), et que les autres coefficients ont une valeur absolue maximale de 1.2410^{-6} . On peut donc valider notre modèle.