Résolution de l'équation de précession d'un moment magnétique par réseau de neurones

Matthieu Carreau
Telecom Paris, Institut Polytechnique de Paris
F-91120, Palaiseau, France
matthieu.carreau@telecom-paris.fr

Supervisors:
Stam Nicolis
Institut Denis Poisson
Université de Tours, Université d'Orléans, CNRS (UMR7013)
Parc de Grandmont, F-37200, Tours, France
stam.nicolis@lmpt.univ-tours.fr

Pascal Thibaudeau
CEA Le Ripault
BP 16, F-37260, Monts, France
pascal.thibaudeau@cea.fr

Juillet 2022

Résumé

On cherche à mettre aux points méthodes numériques permettant d'étudier la précession d'un moment magnétique avec amortissement décrite par l'équation de Landau-Lifshitz-Gilbert [1]. On utilise pour cela des méthodes d'optimisation pour trouver des solutions approchées à des équations différentielles, en fixant un modèle de fonction impliquant un réseau de neurones. On montre comment méthodes d'optimisation, en particulier la descente de gradients, permettent de minimiser une fonction d'erreur afin d'approcher une solution d'une équation différentielle. Ces méthodes sont d'abord testées pour retrouver une primitive d'une fonction trigonométrique, puis pour résoudre un système de deux équations couplées, décrivant la précession de Larmor [2], et enfin sur un système d'équation résultant d'une transformation de l'quation de Landau-Lifshitz-Gilbert, qui décrit le phénomène d'ammortissement.

Table des matières

Chapitre 1

Introduction

Ce rapport est le compte-rendu d'un stage d'un mois ayant pour objet la mise en place et l'implémentation de méthodes de résolution d'équations différentielles à l'aide de réseau de neurones. Le problème physique étudié est celui de la précession d'un moment magnétique dans un champ magnétique, que l'on décrira dans un premier temps par l'équation de précession de Larmor [2], puis par l'équation de Landau-Lifshitz-Gilbert [1]. Cette seconde version de l'équation ne possède pas de solution analytique connue, c'est pourquoi il est pertinent de se pencher sur des méthodes numériques pour en obtenir des solutions approchées.

L'approche proposée ici consiste à utiliser des réseaux de neurones, connus pour leur capacité à approcher des fonctions [6], pour trouver des fonctions "proches" d'être solution d'une équation différentielle. On utilise par conséquent les réseaux de neurones à la manière de [3], [4] et [5], en utilisant les algorithmes d'optimisation connus pour minimiser une fonction d'erreur, qui indique dans quelle mesure une fonction candidate, construite à partir du réseau de neurones, est proche d'être solution.

On écrira lorsque cela sera possible l'équation différentielle d'inconnue $\boldsymbol{M} : \mathbb{R} \to \mathbb{R}^n$ (vecteur adimensionné représentant le moment magnétique) sous une forme similaire à la suivante, où $\boldsymbol{g} : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ est une foncion connue :

$$\begin{cases} \dfrac{d\boldsymbol{M}(t)}{dt} = \boldsymbol{g}(t, \boldsymbol{M}(t)) \\ \boldsymbol{M}(0) = \boldsymbol{M}_0 \end{cases} \tag{1.1}$$

La méthode consiste ensuite à construire une fonction candidate pour

l'équation différentielle comme une somme de deux termes. le premier est un terme non ajustable vérifiant la condition initiale, et le deuxième dépendant des paramètres à entraîner représentés par le vecteur $\boldsymbol{P}$. Ce dernier est construit de façon à ne pas influencer la valeur initiale de la fonction, afin que la condition initiale soit toujours satisfaite, ceci étant réalisé grâce à une fonction $f : \mathcal{R} \to \mathcal{R}$ fixée à l'avance (souvent $f = id_{\mathcal{R}}$)

$$\tilde{\boldsymbol{M}}(t) = \boldsymbol{M}_0 + f(t)\mathcal{N}(t, \boldsymbol{P}) \tag{1.2}$$

On définit ensuite une fonction d'erreur, que l'on calcule à partir de N points $(t_i)_{i\in[\![1,N]\!]}$ de l'intervalle d'étude, de la forme :

$$E(\boldsymbol{P}) = \sum_{i=1}^{N} (\frac{d\tilde{\boldsymbol{M}}}{dt}(t_i) - g(t_i, \tilde{\boldsymbol{M}}(t_i)))^2 \tag{1.3}$$

Il s'agira enfin d'utiliser différentes méthodes d'optimisation propres au réseaux de neurones afin de trouver un vecteur $\boldsymbol{P}$ qui minimise (et idéalement annule) cette fonction d'erreur.

On s'intéressera dans le chapitre 2 à la résolution d'une équation différentielle à une dimension, en choisissant d'abord le terme ajustable $\mathcal{N}(t, \boldsymbol{P})$ sous la forme de séries de Fourier, puis comme la sortie d'un réseau de neurones. On appliquera dans le chapitre 3 les mêmes méthodes pour la résolution d'un système de deux équations couplées représentant le mouvement de précession décrit par l'équation de Larmor. On étudiera ensuite dans le chapitre 4 l'effet de l'ajout du terme d'amortissement introduit dans l'équation de Landau-Lifshitz-Gilbert, en utilisant les méthodes qui auront été établies dans les premiers chapitres. Enfin dans la section 5, je discuterai des résultats obtenus et proposerai quelques perspectives.

Chapitre 2

Equation différentielle à une dimension

On souhaite dans ce chapitre se familiariser avec différentes méthodes sur un cas simple avec une équation différentielle d'ordre 1 en une dimension.

On considère alors M, une fonction réelle à une variable satisfaisant l'équation différentielle suivante, où M_0 désigne la valeur initiale de la fonction :

$$\begin{cases} \dfrac{dM(t)}{dt} + \cos(2\pi t) = 0 \\ M(0) = M_0 \end{cases} \tag{2.1}$$

On cherche à tester les méthodes présentées dans la section 1 sur l'équation (2.1), pour tout $t \in [t_a = 0, t_b = 1]$. L'équation (2.1) et sa condition initiale donnée en $t = 0$, admet une solution analytique unique qui s'écrit

$$M(t) = M_0 - \frac{1}{2\pi}\sin(2\pi t) \tag{2.2}$$

Cela nous permettra par la suite d'évaluer nos solutions numériques, en les comparant à cette solution analytique.

2.1 Solutions en séries de Fourier

On cherche des solutions numériques approchées de l'équation (2.1) sous la forme de séries de Fourier tronquées avec H harmoniques. On écrit pour

cela la solution approchée $\tilde{M}$ comme la somme de deux termes, le premier M_0 constant non ajustable vérifiant la condition initiale, et le deuxième $\mathcal{N}(t, \boldsymbol{A})$ dépendant des coefficients $(A_m)_{H\in[\![1,H]\!]}$ représentés par le vecteur $\boldsymbol{A}$, construit de façon à ne pas influencer la valeur initiale de la fonction.

$$\begin{cases} \tilde{M}(t) = M_0 + \mathcal{N}(t, \boldsymbol{A}) \\ \mathcal{N}(t, \boldsymbol{A}) = \sum_{m=1}^{H} A_m \sin(2\pi m t) \end{cases} \tag{2.3}$$

On définit une fonction d'erreur pour ces solutions potentielles, à partir de la valeur de la dérivée de $\tilde{M}$ aux N points suivants : $\forall i \in [\![1, N]\!], t_i = \frac{i-1}{N}$:

$$\begin{aligned} E &= \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}(\frac{d\tilde{M}}{dt}(t_i) + \cos(2\pi t_i))^2 \\ &= \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}(\sum_{m=1}^{H} 2\pi m A_m \cos(2\pi m t_i) + \cos(2\pi t_i))^2 \end{aligned} \tag{2.4}$$

On cherche à présent le minimum de E en tant que fonction de $\boldsymbol{A}$. Une condition nécessaire sur $\boldsymbol{A}$ pour être un antécédent d'un minimum est

$$\forall l \in [\![1, H]\!], \frac{\partial E}{\partial A_l} = 0 \tag{2.5}$$

Or ces dérivées partielles sont données pour $l \in [\![1, H]\!]$ par :

$$\frac{\partial E}{\partial A_l} = \sum_{i=1}^{N}(\sum_{m=1}^{H} 2\pi m A_m \cos(2\pi m t_i) + \cos(2\pi t_i))2\pi l \cos(2\pi l t_i) \tag{2.6}$$

Les deux méthodes suivantes ont pour objectif de trouver les coefficients $(A_m)_{m\in[\![1,H]\!]}$ qui vérifient la condition 2.5, et de vérifier que le vecteur de coefficients trouvé correspond bien à la solution analytique, i.e $\forall m \in [\![1, H]\!], A_m = -\frac{1}{2\pi}\delta_1^m$.

2.1.1 Inversion du système linéaire

Dans le cas de cette modélisation pour la fonction approchée, la condition 2.5 correspond à un système linéaire de H équations. On peut le représenter en définissant les matrices suivantes :

$$\mathcal{M} = (r_{m,l})_{(m,l)\in[\![1,H]\!]^2}, \boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ \vdots \\ A_H \end{pmatrix}, \boldsymbol{b} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_H \end{pmatrix} \tag{2.7}$$

$$\forall (m,l) \in [\![1,N]\!]^2, \begin{cases} r_{m,l} = 2\pi ml \displaystyle\sum_{i=1}^{N} \cos(2\pi m t_i)\cos(2\pi l t_i) \\ b_l = -l \displaystyle\sum_{i=1}^{N} \cos(2\pi t_i)\cos(2\pi l t_i) \end{cases} \tag{2.8}$$

On souhaite alors résoudre le système linéaire en écrivant l'équation matricielle le représentant, c'est-à-dire :

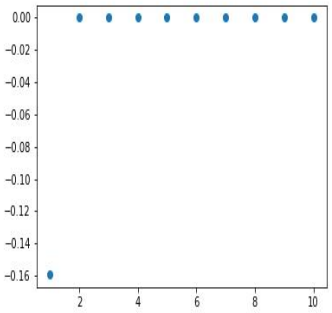
$$\mathcal{M}\boldsymbol{A} = \boldsymbol{b} \Leftrightarrow \boldsymbol{A} = \mathcal{M}^{-1}\boldsymbol{b} \tag{2.9}$$

On réalise l'implémentation en python, en instanciant les matrices définies précédemment et à l'aide de la bibliothèque *numpy*.

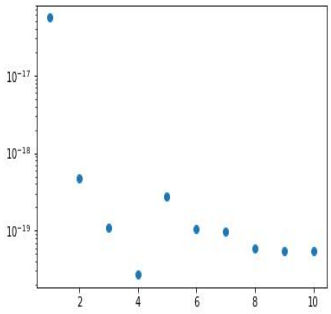
On peut constater que la matrice $\mathcal{M}$ n'est pas toujours inversible selon le choix de H et N. En effet, on peut montrer que c'est nécessairement le cas lorsque $H > N$. Il suffit pour cela d'écrire la matrice $\mathcal{M}$ en fonction de la matrice $\mathcal{A}$ de taille $N \times H$, dont les coefficients sont données par $\forall (i,j) \in [\![1,N]\!] \times [\![1,H]\!], a_{i,j} = j\cos(2\pi j t_i)$. On a alors $\mathcal{M} = 2\pi(\mathcal{A}^T)\mathcal{A}$. On en déduit un majorant du rang de $\mathcal{M}$: $\mathrm{rg}(\mathcal{M}) \leq \min(\mathrm{rg}(\mathcal{A}^T), \mathrm{rg}(\mathcal{A})) = \mathrm{rg}(\mathcal{A}) \leq N$. Ainsi si $N < H$, alors $\mathcal{M}$ n'est pas inversible.

On remarque également qu'elle ne l'est pas non plus lorsque H et N sont proches par exemple pour $H = N = 10$. Il serait interressant d'approfondir ce point pour savoir si cela se traduit par le fait que E admette plusieurs minimums locaux par exemple.

Il semble que choisir $N \gg H$ soit suffisant pour que $\mathcal{M}$ soit inversible. On choisira alors $H = 10, N = 100$ pour la suite. On obtient alors les coefficients présentés en figure 2.1 avec les valeurs absolues des erreurs de chacun par rapport à la valeur théorique. On constate que les erreurs sur chaque coefficient est inférieure à 10^{-16}, on valide donc cette première méthode.



(a) Coefficients trouvés



(b) Valeurs absolue de l'erreur pour chaque coefficient

FIGURE 2.1 – Résultats de la méthode de l'inversion de système

2.1.2 Algorithme de descente de gradients

Profitons de cet exemple simple où le système est linéaire pour se familiariser avec l'algorithme de descente de gradients qui sera utile par la suite. Le principe est de partir d'un vecteur $\boldsymbol{A}^{(0)}$ choisit aléatoirement puis de calculer itérativement un nouveau vecteur $\boldsymbol{A}^{(k)}$ en se déplaçant dans l'espace dans la direction qui minimise le plus l'erreur localement. On définit pour cela les paramètres suivants :

$$\alpha > 0, \boldsymbol{A}^{(0)} = \begin{pmatrix} A_1^{(0)} \\ A_2^{(0)} \\ \vdots \\ A_H^{(0)} \end{pmatrix}, \boldsymbol{g}^{(0)} = \begin{pmatrix} \frac{\partial E^{(0)}}{\partial A_1^{(0)}} \\ \frac{\partial E^{(0)}}{\partial A_2^{(0)}} \\ \vdots \\ \frac{\partial E^{(0)}}{\partial A_H^{(0)}} \end{pmatrix}, \tag{2.10}$$

Puis on calcule itérativement :

$$\boldsymbol{A}^{(k+1)} = \boldsymbol{A}^{(k)} - \alpha \boldsymbol{g}^{(k)} \tag{2.11}$$

On cherche à trouver le coefficient α optimal qui assure la convergence tout en maximisant la vitesse de convergence. On exprime tout d'abord le gradient en fonction de la matrice $\mathcal{M}$ et du vecteur $\boldsymbol{b}$ définis précédemment qui sont indépendants de $\boldsymbol{A}$ et de k :

$$\boldsymbol{g}^{(k)} = \mathcal{M}\boldsymbol{A}^{(k)} - \boldsymbol{b} \tag{2.12}$$

Ainsi, l'équation de récurrence (2.11) se réécrit comme une suite arithmético-géométrique de vecteurs :

$$\boldsymbol{A}^{(k+1)} = (\mathcal{I}_H - \alpha\mathcal{M})\boldsymbol{A}^{(k)} + \alpha\boldsymbol{b} \tag{2.13}$$

Cette équation de récurrence peut se réécrire si $\mathcal{M}$ est inversible en posant $\boldsymbol{A^*} = \mathcal{M}^{-1}\boldsymbol{b}$ (qui est l'unique solution du système linéaire) on arrive à l'expression de $\boldsymbol{A}^{(k)} - \boldsymbol{A^*}$ comme une suite géométrique :

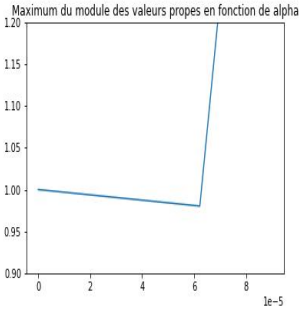
$$\begin{aligned} \boldsymbol{A}^{(k+1)} - \boldsymbol{A^*} &= (\mathcal{I}_H - \alpha\mathcal{M})\boldsymbol{A}^{(k)} + \alpha\boldsymbol{b} - \mathcal{M}^{-1}\boldsymbol{b} \\ &= (\mathcal{I}_H - \alpha\mathcal{M})(\boldsymbol{A}^{(k)} - \boldsymbol{A^*}) \end{aligned} \tag{2.14}$$

Pour s'assurer de la convergence de cette suite, on s'interresse au rayon spectral, c'est-à-dire le maximum du module des valeurs propres, de $\mathcal{R}_\alpha = (\mathcal{I}_H - \alpha\mathcal{M})$, noté $\rho(\mathcal{R}_\alpha)$. La suite $(\boldsymbol{A}^{(k)})_{k\in\mathbb{N}}$ converge si et seulement si la norme de $(\mathcal{R}_\alpha^k)_{k\in\mathbb{N}}$ tend vers 0, sa limite est alors $\boldsymbol{A}^*$. Cela est le cas si et seulement si $\rho(\mathcal{R}_\alpha) < 1$ [8]. De plus, elle convergera d'autant plus vite que son rayon spectral est faible. On trace donc ce maximum en fonction de α en figure 2.2. On en déduit la valeur critique $\alpha_c = 6.2807.10^{-5}$, pour laquelle $\rho(\mathcal{R}_\alpha) = 1$, ainsi que la valeur $\alpha_{min} = 6.2189.10^{-5}$ pour $\rho(\mathcal{R}_\alpha)$ est minimal.

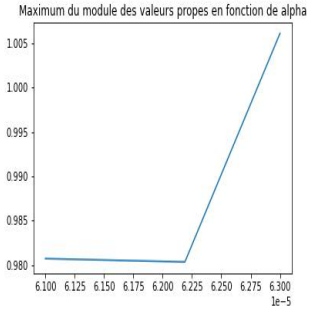
On éxécute l'algorithme en parallèle pour les deux valeurs de α trouvées précédemment ainsi que pour une valeur $\alpha_1 = 6.3.10^{-5}$, tel que $\rho(\mathcal{R}_\alpha) > 1$ On montre l'évolution de l'erreur en fonction du nombre d'itérations en figure 2.3. On constate que α_{min} donne lieu à une décroissance exponentielle de l'erreur pendant les 2000 premières itérations, qui devient ensuite stationnaire. Tandis que α_1 donne une erreur qui croît exponentiellement car la norme de $(\mathcal{R}_\alpha^n)_{n\in\mathbb{N}}$ diverge exponentiellement. La valeur α_c donne une erreur constante, elle correspond au cas limite entre les 2 cas précédents.

On retient donc les résultats obtenus pour α_{min} que l'on montre en figure 2.4 avec les valeurs absolues des erreurs de chacun par rapport à la valeur théorique. On constate que les erreurs sur chaque coefficientest inférieure à 10^{-16}, on valide donc cette seconde méthode.

Cette étude a mis en évidence l'importance du choix du taux d'apprentissage qui détermine le comportement de la suite de vecteurs obtenus lors de la descente de gradients. Cela sera important à garder en tête par la suite, même quand les systèmes à résoudre ne seront plus linéaire et qu'il ne sera



(a) $\alpha \in [0, 10^{-4}]$



(b) Au voisinage de l'intersection avec 1

FIGURE 2.2 – Rayon spectral de $\mathcal{R}_\alpha$ en fonction de α

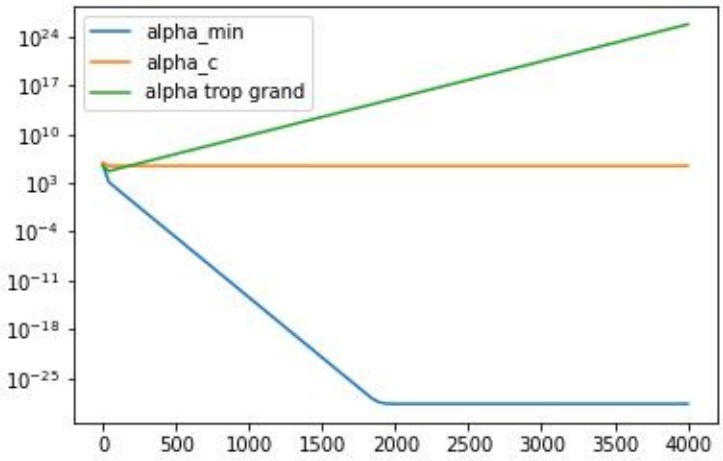
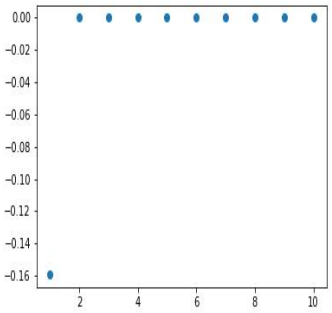
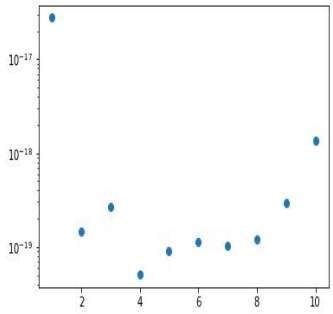


FIGURE 2.3 – Erreurs en fonction du nombre d'itérations pour 3 valeurs de α



(a) Coefficients trouvés



(b) Valeurs absolue de l'erreur pour chaque coefficient

FIGURE 2.4 – Résultats de la méthode de descnte de gradients

plus possible de déterminer à l'avance les valeurs optimales. Elles devront donc être testées empiriquement.

2.2 Solutions par 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 :

$$\begin{cases} \tilde{M}(t) = M_0 + t\mathcal{N}(t, \boldsymbol{P}) \\ \mathcal{N}(t, \boldsymbol{P}) = \sum_{j=1}^{H} v_j \sigma(w_j t + b_j) \end{cases} \tag{2.15}$$

Le terme $\mathcal{N}(t, \boldsymbol{P})$ correspond donc à la sortie d'un réseau de neurones dont l'architecture est présentée en figure 2.5, contenant une couche cachée intermédiaire, qui réalise en sortie une somme pondérée de sigmoïdes, la fonction utilisée est $\forall x \in \mathbf{R}, \sigma(x) = \dfrac{1}{1+e^{-x}}$. Les paramètres $\boldsymbol{P}$ à ajuster sont désormais les coefficients $(w_j)_{j\in[\![1,H]\!]}$, $(b_j)_{j\in[\![1,H]\!]}$ et $(v_j)_{j\in[\![1,H]\!]}$.

Pour plus de détails, la page [7] présente le principe de ce type de réseau de neurones.

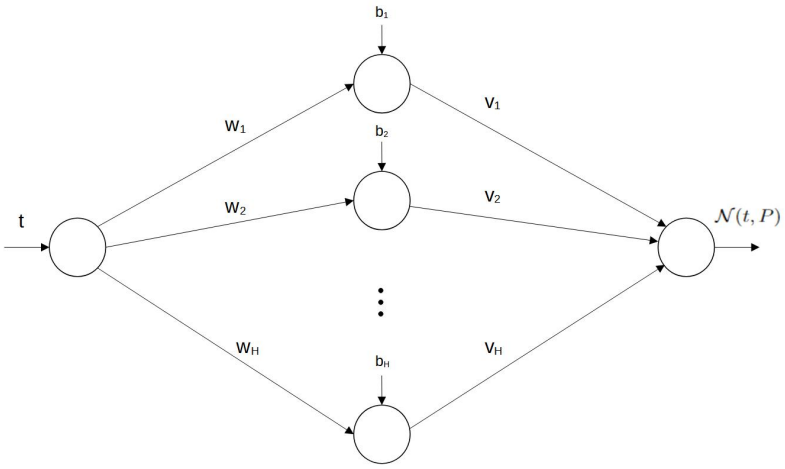


FIGURE 2.5 – Réseau de neurones

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

$$E(\boldsymbol{P}) = \sum_{i=1}^{N} (\frac{d\tilde{M}}{dt}(t_i) + \cos(2\pi t_i))^2 \tag{2.16}$$

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

2.2.1 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 2.6. Cela permet de valider notre modèle sur l'étude à une dimension.

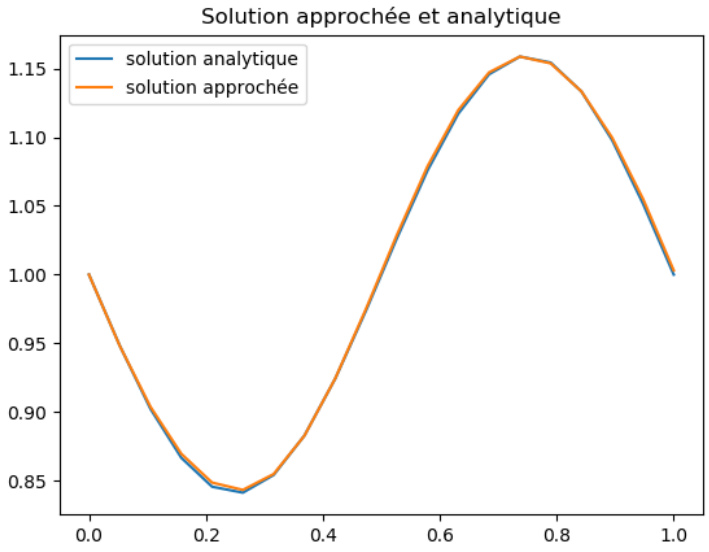


FIGURE 2.6 – estimation de la solution par un réseau de neurones

Chapitre 3

Mouvement de précession

On s'intéresse désormais à l'équation de la précession de Larmor [2] pour un moment magnétique $\boldsymbol{M} \in \mathbb{R}^3$ autour d'un vecteur $\boldsymbol{\omega}$ pointant le long de l'axe z et dont la composante sur cet axe est constante, soit $\boldsymbol{\omega} = \omega_z \boldsymbol{z}$.

$$\frac{d\boldsymbol{M}}{dt} = \boldsymbol{\omega} \times \boldsymbol{M} \tag{3.1}$$

Cette équation implique que $\frac{d\boldsymbol{M}}{dt}$ et $\boldsymbol{\omega}$ soient orthogonaux, ainsi $\frac{dM_z}{dt} = 0$. Par conséquent, on ne considérera que les composantes selon les vecteurs $\boldsymbol{x}$ et $\boldsymbol{y}$ et l'équation 3.1 se réécrit ainsi comme un système de deux équations différentielles couplées :

$$\begin{cases} \dfrac{dM_x}{dt} = \omega M_y \\ \dfrac{dM_y}{dt} = -\omega M_x \end{cases} \tag{3.2}$$

On cherchera les solutions pour $t \in [t_a = 0, t_b = 1]$, en imposant les conditions initiales suivantes :

$$\begin{cases} M_x(0) = M_0 \\ M_y(0) = 0 \end{cases} \tag{3.3}$$

On pourra ensuite comparer nos résultats avec la solution analytique connue de ce système qui vaut :

$$\begin{cases} M_x(t) = M_0 \cos(2\omega t) \\ M_y(t) = -M_0 \sin(2\omega t) \end{cases} \tag{3.4}$$

3.1 Solutions en séries de Fourier

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

$$\begin{cases} \tilde{M}_x(t) = M_0 + \sum_{m=1}^{H} A_m(\cos(m\omega t) - 1) + B_m \sin(m\omega t) \\ \tilde{M}_y(t) = \sum_{m=1}^{H} -A_m \sin(m\omega t) + B_m(\cos(m\omega t) - 1) \end{cases} \tag{3.5}$$

Les coefficients $(A_m)_{m\in[\![1,H]\!]}$ et $(B_m)_{m\in[\![1,H]\!]}$ sont les paramètres à ajuster. On cherche à obtenir la solution analytique, i.e $\forall m \in [\![1, H]\!], A_m = \delta_1^m$ et $\forall m \in [\![1, H]\!], B_m = 0$.

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

$$E(\boldsymbol{P}) = \sum_{i=1}^{N} (\frac{d\tilde{M}_x}{dt}(t_i) - \omega \tilde{M}_y(t_i))^2 + (\frac{d\tilde{M}_y}{dt}(t_i) + \omega \tilde{M}_x(t_i))^2 \tag{3.6}$$

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

On peut se ramener à l'écriture du cas à une dimension définissant le vecteur $\boldsymbol{P}$ comme la concaténation des vecteurs $\boldsymbol{A}$ et $\boldsymbol{B}$ et le vecteur $\boldsymbol{g}$ comme le vecteur contenant les dérivées partielles de E par rapport à chaque composante de $\boldsymbol{P}$.

$$\boldsymbol{P}^{(k)} = \begin{pmatrix} A_1^{(k)} \\ \vdots \\ A_H^{(k)} \\ B_1^{(k)} \\ \vdots \\ B_H^{(k)} \end{pmatrix}, \boldsymbol{g}^{(k)} = \begin{pmatrix} \frac{\partial E^{(k)}}{\partial A_1^{(k)}} \\ \vdots \\ \frac{\partial E^{(k)}}{\partial A_H^{(k)}} \\ \frac{\partial E^{(k)}}{\partial B_1^{(k)}} \\ \vdots \\ \frac{\partial E^{(k)}}{\partial B_H^{(k)}} \end{pmatrix}, \tag{3.7}$$

Il existe alors une nouvelle matrice $\mathcal{M}$ d'ordre $2H$ ainsi qu'un nouveau vecteur $\boldsymbol{b}$ de taille $2H$ tels que les équations définissant la descente de gradients soient les suivantes :

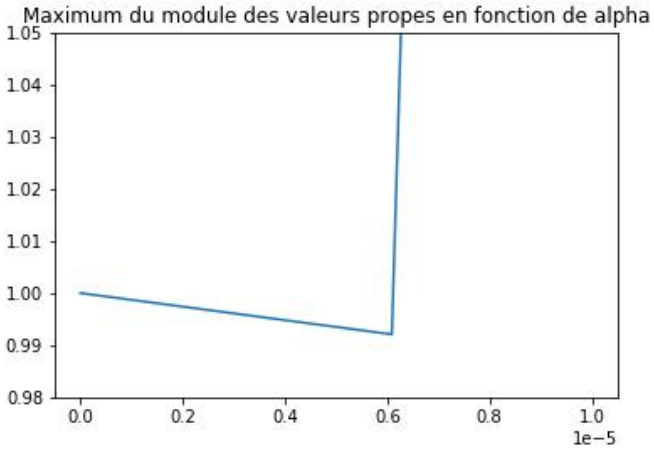


FIGURE 3.1 – Evolution du maximum du module en fonction de α

$$\boldsymbol{P}^{(k+1)} = \boldsymbol{P}^{(k)} - \alpha \boldsymbol{g}^{(k)} \tag{3.8}$$

$$\boldsymbol{g}^{(k)} = \mathcal{M}\boldsymbol{P}^{(k)} - \boldsymbol{b} \tag{3.9}$$

$$\boldsymbol{P}^{(k+1)} = (\mathcal{I}_H - \alpha\mathcal{M})\boldsymbol{P}^{(k)} + \alpha\boldsymbol{b} \tag{3.10}$$

On réalise la même étude qu'en dimension 1 pour la recherche du coefficient α_{min} qui minimise le maximum des modules des valeurs propres de $\mathcal{R}_\alpha = \mathcal{I}_H - \alpha\mathcal{M}$, ainsi que le coefficient α_c à ne pas dépasser, à partir duquel ce maximum et supérieur à 1 et la suite diverge. On trouve les valeurs suivantes $\alpha_{min} = 6.0906.10^{-6}$ et $\alpha_c = 6.1146.10^{-6}$, et l'évolution du maximum en fonction de α est montré en figure 3.1.

On éxécute l'algorithme en choisissant la valeur α_{min} précédente et on montre l'évolution de l'erreur en fonction du nombre d'itérations en figure 3.2. On constate comme dans le cas à 1 dimension que α_{min} donne lieu à une décroissance exponentielle de l'erreur, cette fois pendant les 4500 premières itérations, qui devient ensuite quasiment stationnaire, de l'ordre de 10^{-25}.

Les coefficients finaux de $\boldsymbol{P}$ ainsi que les valeurs absolues de leurs erreurs sont représentées en figure 3.3. On peut constater que l'on retrouve bien les coefficients attendus, avec une erreur au maximum de l'ordre de 10^{-15}.

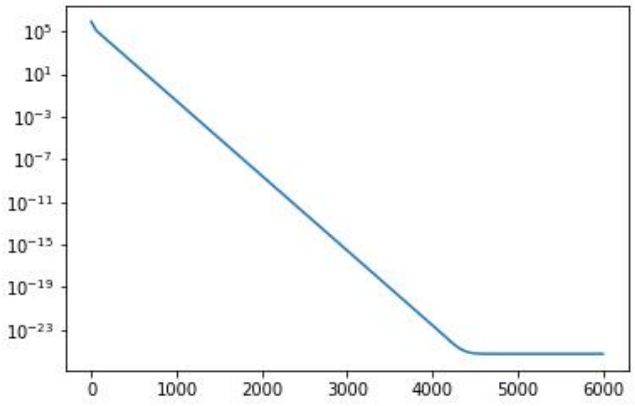
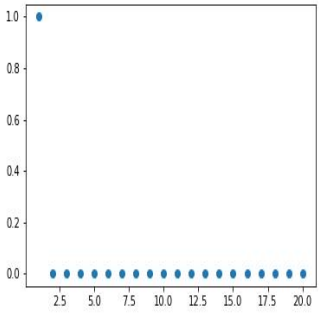
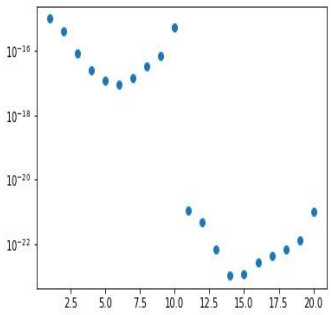


FIGURE 3.2 – Valeur de la fonction d'erreur en fonction du nombre d'itérations



(a) Coefficients trouvés



(b) Valeurs absolue de l'erreur pour chaque coefficient

FIGURE 3.3 – Résultats de la méthode de descente de gradients pour le mouvement de précession

3.2 Solutions aprochées par un réseau de neurones

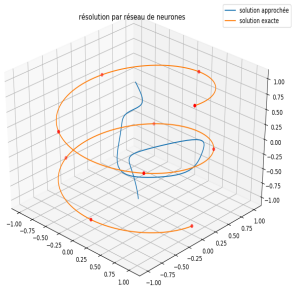
On cherche dans ce paragraphe à approcher la solution du système des 2 équations grâce à un réseau de neurones. On choisit l'architecture suivante pour le réseau de neurones : 1 entrée pour la variable temporelle, une première couche intermédiaire de $h_1 = 32$ neurones, une seconde couche intermédiaire de $h_2 = 8$ neurones, toutes deux utilisant la sigmoïde définie précédement comme fonction d'activation, et enfin 2 neurones de sortie connectées à la deuxième couche intermédiaire, avec l'identité comme fonction d'activation en sortie. On note les sorties de ces deux derniers neurones respectivement $\mathcal{N}_x(t, \boldsymbol{P})$ et $\mathcal{N}_y(t, \boldsymbol{P})$, où $\boldsymbol{P}$ représente l'ensemble des paramètres du réseau de neurones. On construit alors nos solutions approchées de la façon suivante :

$$\begin{cases} \tilde{M}_x(t) = M_0 + t\mathcal{N}_x(t, \boldsymbol{P}) \\ \tilde{M}_y(t) = t\mathcal{N}_y(t, \boldsymbol{P}) \end{cases} \tag{3.11}$$

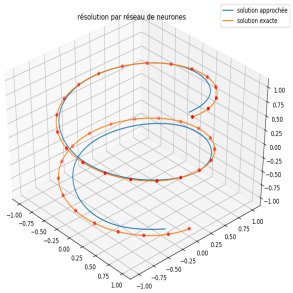
On définit une fonction d'erreur pour ces solutions potentielles, en s'interressant aux N points suivants de l'intervalle $[t_a = -1, t_b = 1]$: $\forall i \in [\![1, N]\!], t_i = -1 + 2\frac{i-1}{N}$:

$$E(\boldsymbol{P}) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(\frac{d\tilde{M}_x}{dt}(t_i) - \omega\tilde{M}_y(t_i))^2 + (\frac{d\tilde{M}_y}{dt}(t_i) + \omega\tilde{M}_x(t_i))^2 \tag{3.12}$$

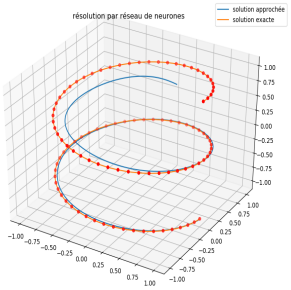
On choisit ensuite les paramètres d'entraînement suivants : taux d'apprentissage : 0.007, 50000 itérations, et on lance 3 entraînements pour $N \in \{10, 40, 100\}$. On obtient les résultats montrés en figure 3.4, où l'axe vertical représente le temps, et les axes horizontaux représentent M_x et M_y. La solution analytique est représentée en orange, la solution approchée est représentée en bleu, et les points rouges sont les points correspondant aux points d'entraînement $(t_i)_{i\in[\![1,N]\!]}$.



(a) Solution obtenue pour $N = 10$



(b) Solution obtenue pour $N = 40$



(c) Solution obtenue pour $N = 100$

FIGURE 3.4 – Représentations graphiques de M_x et M_y en fonction du temps par le réseau de neurones

Chapitre 4

Précession avec amortissement

Dans ce chapitre, on s'intéresse à déterminer le mouvement de précession d'un moment magnétique $\boldsymbol{M} \in \mathbb{R}^3$ amorti. Son équation d'évolution est représentée en fonction d'une constante d'amortissement réelle et sans dimension notée λ et s'établit, pour simplifier, autour d'un vecteur $\boldsymbol{\omega}$ pointant le long de l'axe z et dont la composante sur cet axe est constante, soit $\boldsymbol{\omega} = \omega_z \boldsymbol{z}$.

L'équation considérée prend le nom d'équation de precession avec un terme d'amortissement introduit par Gilbert [1] et s'écrit

$$\frac{d\boldsymbol{M}}{dt} = (\boldsymbol{\omega} - \lambda \frac{d\boldsymbol{M}}{dt}) \times \boldsymbol{M} \tag{4.1}$$

Cette équation vectorielle admet plusieures propriétés remarquables que nous allons exploiter.

4.1 Projection en coordonnées cartésiennes

En prenant le produit vectoriel par $\boldsymbol{M}$ à gauche des deux membres de l'équation 4.1, on forme une projection sur un plan normal à $\boldsymbol{M}$:

$$\boldsymbol{M} \times \frac{d\boldsymbol{M}}{dt} = \boldsymbol{M} \times ((\boldsymbol{\omega} - \lambda \frac{d\boldsymbol{M}}{dt}) \times \boldsymbol{M}) \tag{4.2}$$

Aprés développement, et le changement d'échelle temporelle $\tilde{t} = (1+\lambda^2)t$, on obtient 3 nouvelles équations différentielles scalaires :

$$\begin{cases} \dfrac{dM_x}{d\tilde{t}} = -M_y\omega_z - \lambda M_x M_z \omega_z \\ \dfrac{dM_y}{d\tilde{t}} = M_x\omega_z - \lambda M_y M_z \omega_z \\ \dfrac{dM_z}{d\tilde{t}} = \lambda\omega_z(1 - M_z^2) \end{cases} \tag{4.3}$$

On remarque que l'équation sur M_z est découplée des 2 autres, on cherche ainsi à résoudre celle-ci en premier lieu.

4.1.1 Résolution de l'équation sur M_z

On utilise la même approche avec un réseau de neurones que précédemment à l'aide d'un réseau de neurones. On réalisera à présent les implémentations en python à l'aide de la bibliothèque TensorFlow.

On choisit comme architecture du réseau de neurones une entrée pour la variable temporelle, suivie de couches intermédiaires contenant respectivement h_1 et h_2 neurones, connectés à la sortie unique du réseau de neurones, dont les paramètres sont représenté par le vecteur $\boldsymbol{P}$. Comme précédemment, afin de satisfaire la condition initiale, on cherche les fonction $\tilde{M_z}$ sous la forme suivante, où $\mathcal{N}(\tilde{t}, \boldsymbol{P})$ représente la sortie du réseau de neurones.

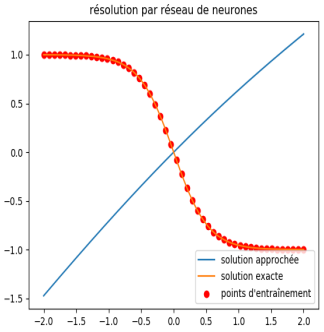
$$\tilde{M_z}(\tilde{t}) = M_z(0) + \tilde{t}\mathcal{N}(\tilde{t}, \boldsymbol{P}) \tag{4.4}$$

On définit la fonction d'erreur suivante :

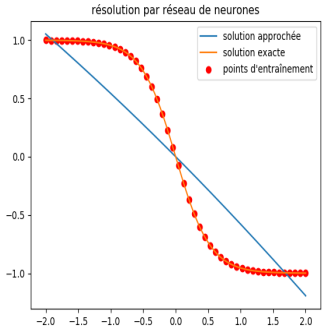
On fixe les paramètres suivants : $\lambda = 0.3$, nombre de points de tests : $N = 30$, $h_1 = 16$, $h_2 = 8$, intervalle d'étude : $[t_a = -1, t_b = 1]$, $M_z(0) = 0$. Lors des essais d'entraînement du modèle on fait face à plusieurs problèmes. On remarque que souvent la sortie du réseau de neurones est quasiment constantesur l'intervalle d'étude. Ainsi, il semble que l'entraînement ne consiste alors dans ce cas qu'à ajuster cette valeur constante pour minimser la fonction d'erreur dans le cas où M_z est linéaire par rapport à $\tilde{t}$, (d'après l'équation 4.4,pour $\mathcal{N}(\tilde{t}, \boldsymbol{P}) = \mu \in \mathbf{R}$ constante, et $M_z(0) = 0$).

Après plusieurs essais d'entraînement, on remarque que l'on tombe sur l'une ou l'autre des 2 solutions présentées en figure 4.1.

On peut vérifier cette hypothèse en exprimant analytiquement notre fonction d'erreur pour une fonction M_z linéaire : $\forall \tilde{t} \in \mathbf{R}, \tilde{M_z}(\tilde{t}) = \mu\tilde{t}$. On peut calculer notre erreur, en fonction de μ, en remplaçant la somme discrète par



(a) Première solution linéaire



(b) Seconde solution linéaire

FIGURE 4.1 – Solutions trouvées pour M_z après de rapides entraînements

une intégrale qui peut être calculée facilement car l'intégrande est alors une fonction polynomiale en $\tilde{t}$:

$$\begin{aligned} E(\mu) &= \frac{1}{t_b - t_a} \int_{t_b}^{t_a} \left(\frac{d\tilde{M}_z}{d\tilde{t}}(\tilde{t}) - \lambda\omega_z(\tilde{M}_z(t)^2 - 1)\right)^2 d\tilde{t} \\ E(\mu) &= \frac{16}{5}\lambda^2\omega_z^2\mu^4 - \frac{8}{3}\lambda\omega_z\mu^3 + (1 - \frac{8}{3}\lambda^2\omega_z^2)\mu^2 + 2\lambda\omega_z\mu + \lambda^2\omega_z^2 \end{aligned} \tag{4.5}$$

On remarque alors que cette fonction admet deux minimums locaux qui ont pour valeurs approchées : $\mu_a \approx 0.696$, $E(\mu_a) \approx 3.04$ et $\mu_b \approx -0.574$,$E(\mu_b) \approx -0.78$. Cela est effectivement proche des valeurs que l'on obtient lors des entraînements montrés en figure 4.1. En effet, sur le premier exemple, la sortie du réseau de neurones varie entre 0.60 et 0.74 sur l'intervalle étudié, et la valeur finale de l'erreur est 3.04, ce qui correspond à μ_b et $E(\mu_b)$. Pour le second exemple, la sortie est comprise entre -0.60 et -0.52, et l'erreur vaut 0.82, ce qui correspond bien au second minimum local $E(\mu_a)$.

On peut alors remettre en question le modèle choisi pour notre réseau de neurones, qui n'est pas forcément le plus adapté. On peut par exemple essayer de changer les fonctions d'activation utilisées par les couches intermédiaires, qui étaient des sigmoïdes, et les remplacer par la fonction *relu*.

On a ainsi pu obtenir des résultats satisfaisants visibles en figure 4.2 en lançant l'entraînement avec les fonctions *relu* pour 10000 itérations, avec un taux d'apprentissage de 10^{-3},$N = 50$, $[t_a = -2, t_b = 2]$. L'erreur finale est de 0.018.

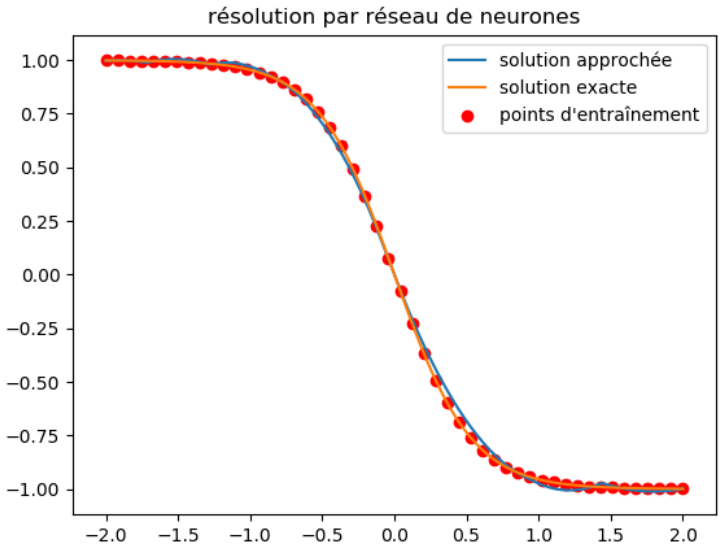


FIGURE 4.2 – Résultats obtenus avec la fonction d'activation *relu*

Une autre tentative consiste à simplifier l'architecture du réseau de neurones en supprimant la seconde couche intermédiaire pour ne conserver que la première et ainsi diminuer fortement la dimension de l'espace dans lequel on cherche le meilleur vecteur $\boldsymbol{P}$. Avec les paramètres d'entrainement suivants : 100000 itérations, avec un taux d'apprentissage de 1.10^{-2},$N = 50$, $[t_a = -2, t_b = 2]$. L'erreur finale est de $2.7.10^{-4}$, mais continue à décroître. On voit en figure 4.3 que les courbes des solutions exactes et approchées se confondent.

4.1.2 Résolution des équations sur Mx et My

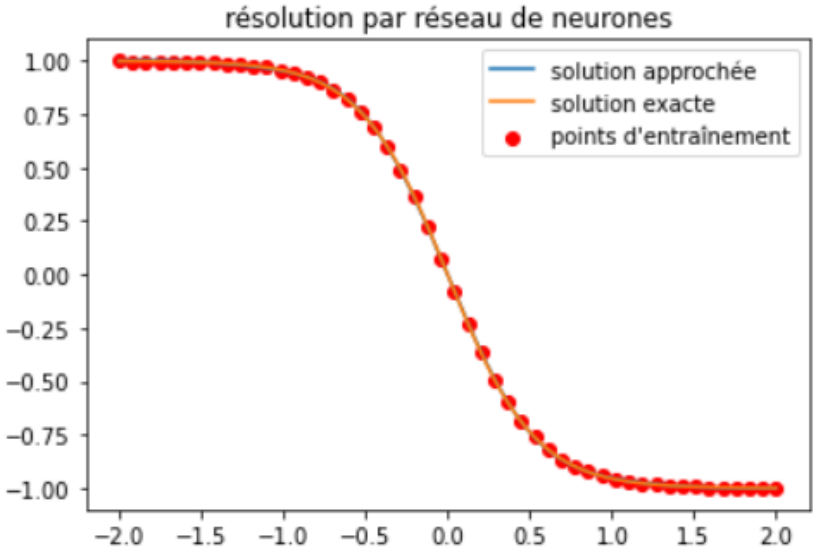


FIGURE 4.3 – Résultats obtenus avec la fonction d'activation *relu*

Chapitre 5

Conclusion et perspectives

L'utilisation de réseau de neurones pour la résolution numérique d'équations différentielles à l'avantage par rapport à d'autres méthodes

Bibliographie

[1] Wikipedia, Équation de Landau-Lifshitz-Gilbert

[2] Wikipedia, Précession de Larmor

[3] T.T.Dufera, Machine Learning With Applications **5** 100058 (2021)

[4] I. E. Lagaris, A. Likas and D. I. Fotiadis, IEEE Transactions on Neural Networks **9** no. 5 pp. 987-1000 (1998)

[5] A.Malek * and R.Shekari Beidokhti, Applied Mathematics and Computation **183** 260–271(2006)

[6] Z.Zainuddin and P.Ong, WSEAS Transactions on Mathematics Volume **7** Issue 6 pp 333–338(2008)

[7] Wikipedia, Réseaux de neurones

[8] Wikipedia, Rayon spectral et suites des puissances