

Rapport de stage

Clement Lotteau

June 2020

Résumé

Table des matières

1	Introduction : réseaux de neurones	1
1.1	Concepts et vocabulaire	1
1.2	Fit d'une gaussienne	1
2	Minimisation de l'énergie : méthode stochastique	1
2.1	Calcul de l'énergie à partir d'un fit	1
2.2	Utilisation de l'aléatoire	3
3	Méthode Runge-Kutta d'ordre 4	6

1 Introduction : réseaux de neurones

1.1 Concepts et vocabulaire

1.2 Fit d'une gaussienne

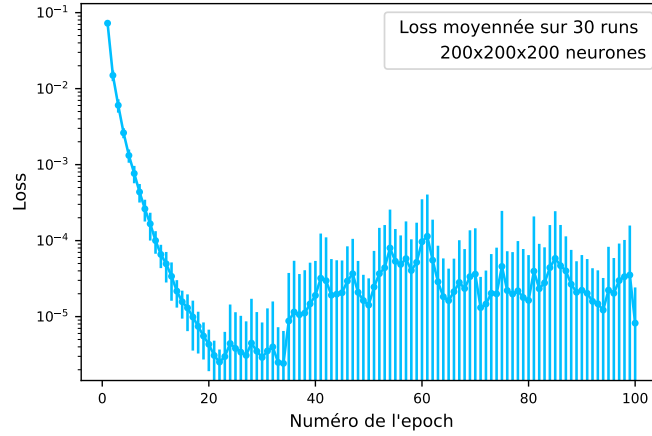


FIGURE 1: Loss a chaque epoch moyenné sur 30 runs. Barres d'erreur avec l'écart-type des loss pour chaque numéro d'epochs. N.N. : 200x200x200 neurones, 50 batchsize.

2 Minimisation de l'énergie : méthode stochastique

2.1 Calcul de l'énergie à partir d'un fit

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right] \psi(x) = E \psi(x) \quad (1)$$

Je multiplie (1) à gauche par $\psi(x)$ et j'intègre par partie :

$$E = \frac{\frac{-\hbar^2}{2m} \left([\psi \psi']_a^b - \int_a^b |\psi'|^2 dx \right) + \frac{1}{2} m \omega^2 \int_a^b x^2 |\psi|^2 dx}{\int_a^b |\psi|^2 dx} \quad (2)$$

On obtient les solutions analytique en intégrant de $-\infty$ à $+\infty$:

$$E_c = \frac{\hbar \omega}{4} \quad ; \quad E_p = \frac{\hbar \omega}{4} \quad ; \quad E_{totale} = \frac{\hbar \omega}{2} \quad (3)$$

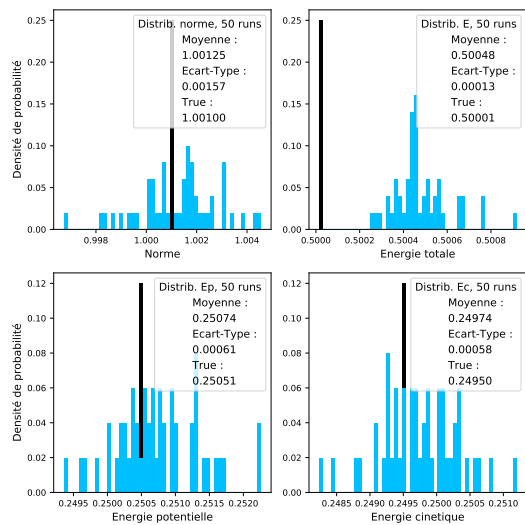
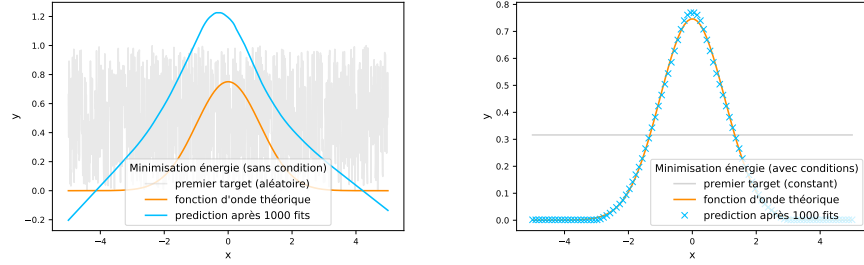


FIGURE 2: Les barres noires sont des repères visuels de la fonction à fitter.

2.2 Utilisation de l'aléatoire

Le but ici est de se servir des erreurs de fit pour sélectionner une prédiction comme nouveau target si l'énergie de cette dernière est inférieure à la fonction à fitter. Le réseau "se fit lui-même".



(a) Sans condition, discrétisation sur 1000 points. (b) Avec les conditions, discrétisation sur 100 points.

FIGURE 3

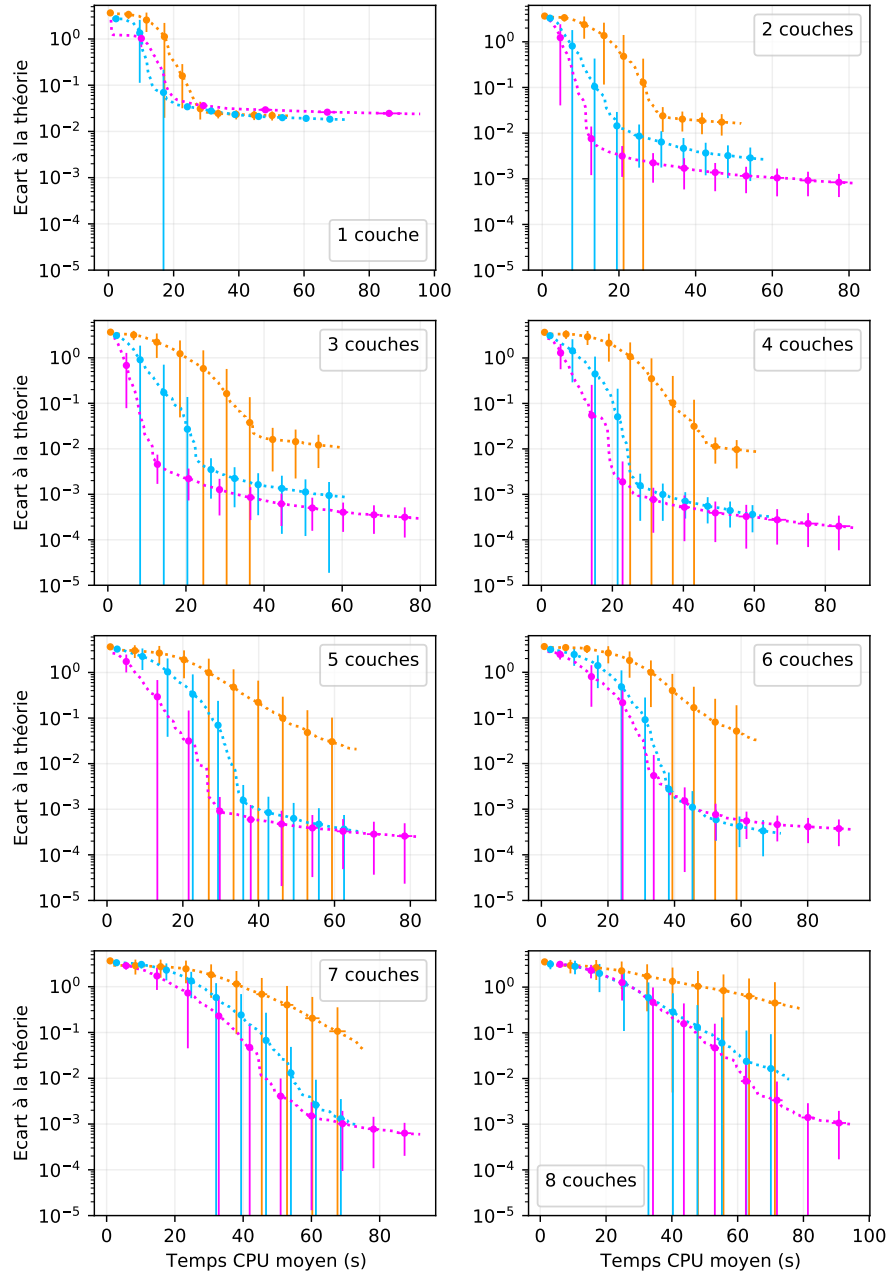


FIGURE 4: Orange : 500 paramètres ; Bleu : 5000 ; Rose : 30600. Les courbes s'arrêtent lorsque le programme a effectué 10000 itérations, à l'exception de "1 couche - 30600 paramètres" qui est coupée à 5000 itérations pour des raisons de lisibilité (200 secondes au total)

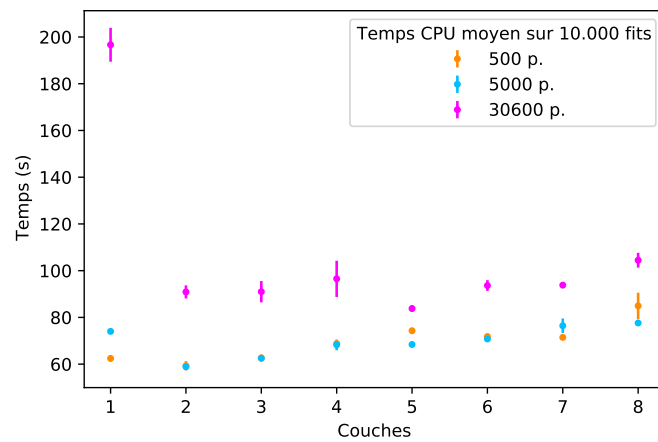


FIGURE 5

3 Méthode Runge-Kutta d'ordre 4

Balayage en énergie et tracer des états liés d'un oscillateur harmonique par la méthode Runge-Kutta d'ordre 4.

État	Énergie
0	-2.71840
1	-2.15447
2	-1.58494
3	-0.993463
4	-0.348762

On observe que, contrairement à la théorie, l'écart entre les énergies n'est pas constant. La figure 6 montre aussi que les fonctions d'onde ne tendent pas vers 0 lorsque l'énergie augmente. Ces deux problèmes sont dus à la taille de la "boite" qui est trop petite... etc.

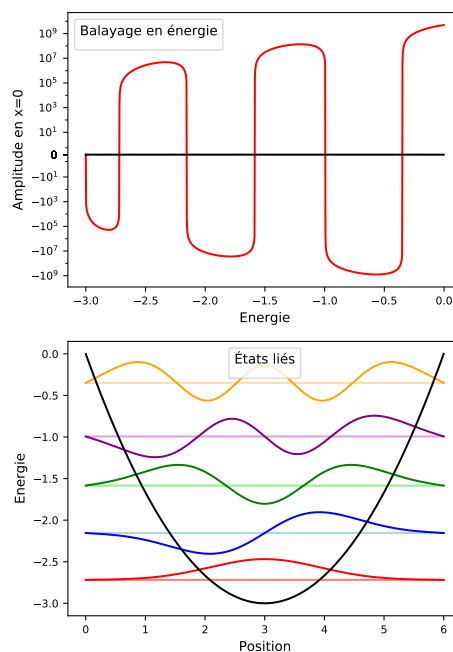


FIGURE 6: Balayage en énergie et tracer des états liés. Les fonctions d'onde sont alignées sur leurs énergies.