

Méthodes numériques – TD5

Optimisation non-linéaire

Dans ce TD, nous aborderons les notions liées à l'optimisation non-linéaire. Pour cela, nous utiliserons la fonction **lsqnonlin**. Il est fortement conseillé de se référer à sa documentation.

Dans le cadre de ce TD, nous allons mettre en œuvre des méthodes d'optimisation non linéaire sur un jeu de données représentant 3 nuages d'atomes juxtaposés dans l'espace. Le fichier de données que nous souhaitons analyser est « Data_multi_gaussian.mat ». On veut approcher les données par une somme d'un offset (une constante) et de 3 Gaussiennes de la forme :

$$g_{A,\sigma,\mu}(x) = A e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}$$

avec A , μ et σ des paramètres indépendants pour chacune des 3 Gaussiennes.

1 Premier essai avec **lsqnonlin**

1. Formulez la fonction d'objectif sous la forme $e(x) = \sum_i r_i^2(x) = \|\mathbf{r}(x)\|^2$
2. Pour utiliser la procédure d'optimisation **lsqnonlin**, il nous faut créer une fonction évaluant les valeurs de \mathbf{r} pour un jeu de paramètres \mathbf{x} . Vous en trouverez la forme dans la documentation : <https://fr.mathworks.com/help/optim/ug/lsgnonlin.html>
3. Testez **lsqnonlin** dans sa version la plus simple (avec seulement 2 paramètres) en prenant comme solution initiale 3 Gaussiennes d'amplitudes 1, de variance 1, et grossièrement centrées sur les 3 pics des données (ex, 50, 100, 180), et 0 pour l'offset.

2 Levenberg-Marquardt

Devant le demi-échec précédent, nous allons maintenant essayer d'exploiter les dérivées analytiques des résidus, c'est à dire la matrice Jacobienne \mathbf{J}_r du vecteur \mathbf{r} , et utiliser un solveur dédié à notre problème, à savoir la méthode de Levenberg-Marquardt.

1. Mettez à jour la fonction d'évaluation de \mathbf{r} précédente pour calculer et retourner la matrice \mathbf{J}_r en seconde valeur de retour. Suivez la description de l'argument *fun* ici de la fonction **lsqnonlin** : <https://fr.mathworks.com/help/optim/ug/lsgnonlin.html#buuhch7-2>.
Astuce : Pour le calcul des dérivées, vous pouvez éventuellement vous aider d'outils en ligne comme <https://www.derivative-calculator.net/>.
2. Activez l'utilisation de la méthode Levenberg-Marquardt et de la matrice Jacobienne.
3. Testez avec la solution initiale précédente.

3 Gauss-Newton

Afin de mieux comprendre les mécanismes mis en jeu dans les solveurs non-linéaires et le rôle de cette matrice Jacobienne, mettez en œuvre un solveur basique de type Gauss-Newton et testez en partant toujours de la même solution initiale.

Conseils :

- Pour commencer, fixez le nombre d'itérations, par ex. 20.
- Calculez et affichez la norme du résidu au cours des itérations pour vérifier qu'il décroît.
- Si ce n'est pas le cas, réduisez la longueur du pas jusqu'à ce que le résidu décroît.

4 Oscillation de Rabi d'un système à trois niveaux.

Description du système physique :

Un état atomique de moment angulaire total $F=1$ peut se décomposer sur la base de ces 3 projections : $m_F=+1, 0, -1$.

L'interaction entre un champ magnétique statique et l'atome vaut : $U = -m_F \cdot \mu_B \cdot |B|$

Pour un minimum de $|B|$ forme donc un piège pour l'états de projection $m_F=-1$. Dans ce piège, la position d'équilibre des atomes est donnée par la contrainte supplémentaire $F = -\vec{\nabla}U$ $F=mg$. (Compensation de la gravité), où

Ainsi pour $m_F=-1$ la somme des forces en présence du champ magnétique vaut 0 (piège) alors quelle vaut mg pour $m_F=0$ et $2mg$ pour $m_F=1$.

Dans l'expérience, on prépare et on piège magnétiquement un nuage d'atomes froids dans l'état $m_F=-1$. On soumet ensuite ce nuage à un rayonnement radio-fréquence dont la fréquence est à résonnance avec les transitions $m_F=-1 \leftrightarrow m_F=0$ et $m_F=0 \leftrightarrow m_F=1$. Ce rayonnement transfère une partie des populations atomiques du niveau $m_F=-1$ vers les niveaux $m_F=0$ et $m_F=1$. C'est ce processus qui est appelé oscillation de Rabi d'un système à trois niveaux. Comme la somme des forces extérieures est différente pour chacun de ces états, ils vont se séparer et on peut les discriminer après temps de vol.

1. Déterminez le ratio des nombres d'atomes des états $m_F=-1, 0$ et $+1$