

Étude de la dynamique moléculaire *ab initio* par un réseau de neurones de haute dimension : cas de la molécule d'eau

M.R. Youbi Kemmogne, S.G. Nana Engo

rose.youbi@facsciences-uy1.cm

https://github.com/youbirose/MEMAQUAN_2022

Laboratoire de Physique Nucléaire, Atomique, Moléculaire et Biophysique
Département de Physique
Université de Yaoundé I

Bénin, 11-15 juillet 2022



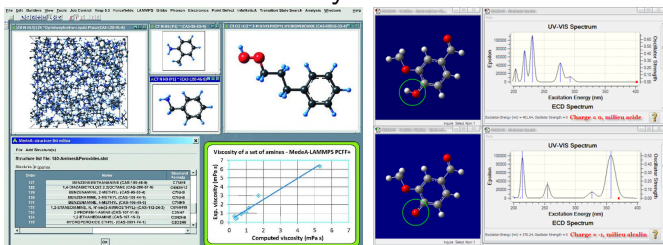
- ① Mise en contexte
- ② Méthode traditionnelle
- ③ Méthode moderne
- ④ Réseau de neurones (NNP)
- ⑤ NNP de haute dimension



Mise en contexte

Définition

Simulation d'un système moléculaire

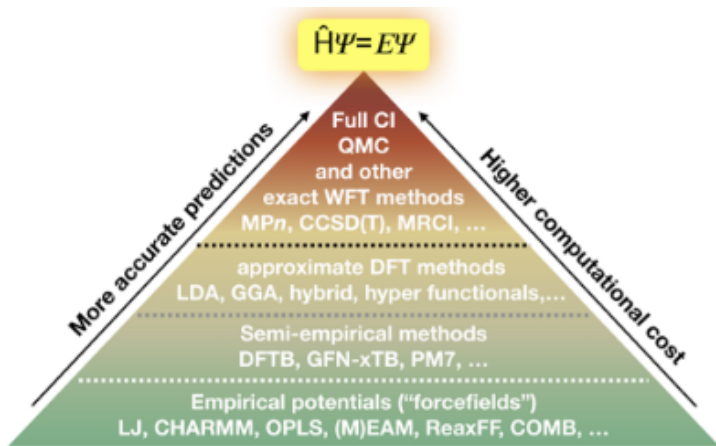


- Propriétés électroniques : conductivité
- Propriétés mécaniques : plasticité
- Propriétés dynamiques : perméation (**mécanisme de diffusion**)

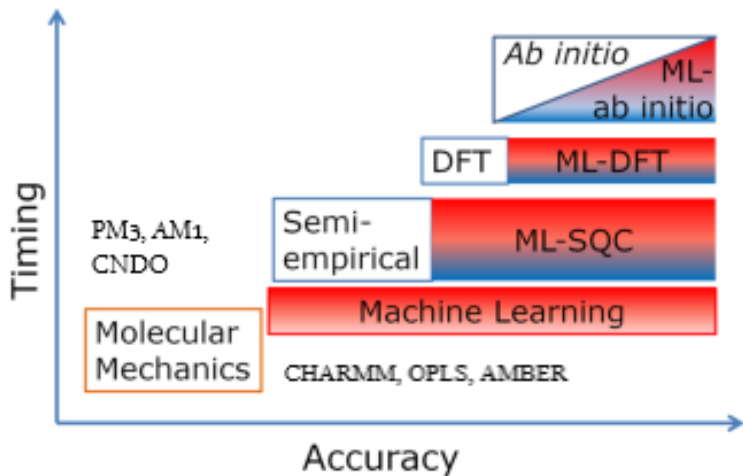


Méthode traditionnelle

- **DM** $F_i = m_i a_i = m_i \frac{d^2 r_i(t)}{dt^2} = -\frac{\partial E}{\partial r_i}$
- **DMAI = DM + Calcul de structure électronique**
- **Calcul de structure électronique**

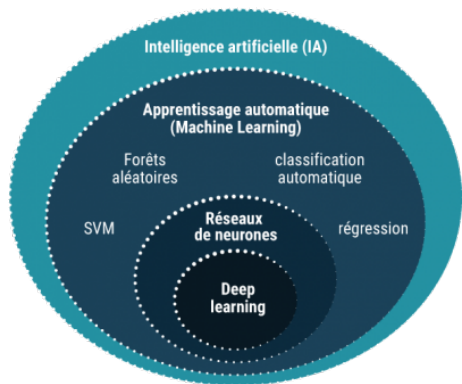


Comment déterminer les propriétés d'une molécule avec bonne précision en un temps raisonnable ?



Méthode moderne

Machine learning

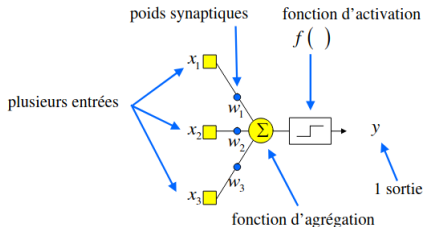
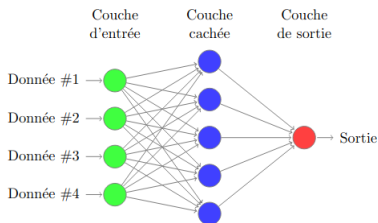


- Réseaux de neurones convolutifs
- Réseaux de neurones récurrents
- Réseaux de neurones Forward



Réseau de neurones (NN)

Fonctionnement d'un NN : **Forward propagation**



Étape d'agrégation

$$z = w_1x_1 + w_2x_2 + w_3x_3 = \sum w_i x_i + b \quad (1)$$

Pour un PCM (Perceptron Multicouche),

$$z_j^k = \sum_{i=1}^n w_{ij}^k x_i^{k-1} + b_j^k \quad (2)$$

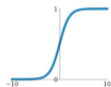
Definition (La fonction d'activation)

Fonction mathématique notée $a_j^k = f_k(z_j^k)$ qui active le neurone lorsque z_j^k attend un certain seuil et retourne une sortie y_{pred}

$$y_{pred} = \begin{cases} 1 & \text{si } z_j^k \geq 0 \\ 0 & \text{si } z_j^k < 0 \end{cases} \quad (3)$$

$$y_{pred}(x, i, j, k) = f^k \left(b_{0,1}^k + \sum_{j=1}^{l(k-1)} w_j^{k,k-1} x_i^{k-1} \right) \quad (4)$$

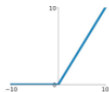
Il existe plusieurs types de fonction d'activation



Sigmoïde



Tangent
hyperbolique



ReLU

Limites d'un NNP

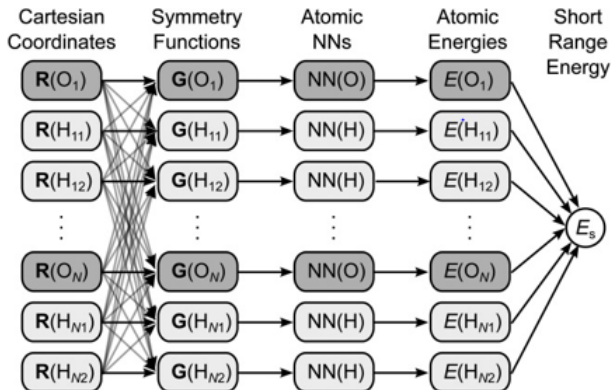
- Le nombre de degrés de liberté de chaque atome : 03 degrés par atome
- Le nombre total de nœuds d'entrée devient trop important
- La symétrie interatomique
- Le descripteur de l'environnement atomique doit avoir une dimension constante



NNP de haute dimension

Définition

- Réseau de neurones potentielle de haute dimension (HDNNP) constitué de plusieurs NNP



- R représente les coordonnées de chaque atome



$$E_s = \sum_j^{N_{el}} \sum_i^N E_i^j = \sum_i^{N^{hydrog\ne}} E_i^{hydrog\ne} + \sum_j^{N^{oxyg\ne}} E_j^{oxyg\ne} \quad (5)$$

où,

$$E^{hydrog\ne} = f_1^3 \left(b_1^3 + \sum_{k=1}^{20} w_{k1}^{23} f_k^2 \left(b_k^2 + \sum_{j=1}^{20} w_{jk}^{12} f_j^1 \left(b_k^1 + \sum_{i=1}^{62} w_{ij}^{01} G_i \right) \right) \right) \quad (6)$$

$$E^{oxyg\ne} = f_1^3 \left(b_1^3 + \sum_{k=1}^{20} w_{k1}^{23} f_k^2 \left(b_k^2 + \sum_{j=1}^{20} w_{jk}^{12} f_j^1 \left(b_k^1 + \sum_{i=1}^{31} w_{ij}^{01} G_i \right) \right) \right) \quad (7)$$



Fonctions de symétrie

Les représentations structurellement équivalentes du système doivent donner lieu au même ensemble de valeurs de coordonnées

- Fonction de symétrie radiale

$$G_i^2 = \sum_{j \neq i} e^{-\eta(r_{ij}-r_s)^2} f_c(r_{ij}) \quad (8)$$

- Fonction de symétrie angulaire

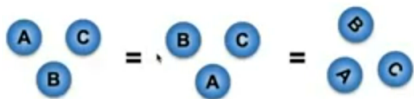
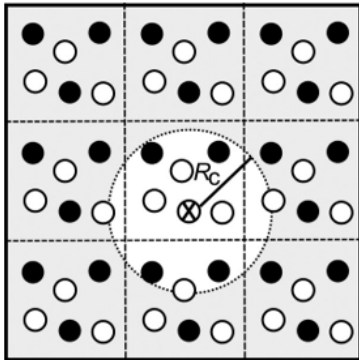
$$G_i^4 = 2^{1-\zeta} \sum_{j \neq i} \sum_{k \neq i, j} [(1 + \lambda \cos(\alpha_{ijk}))^\zeta e^{-\eta(r_{ij}^2 + r_{ik}^2 + r_{jk}^2)} f_c(r_{ij}) f_c(r_{ik}) f_c(r_{jk})] \quad (9)$$

avec

$$f_c(r_{ij}) = \begin{cases} 0.5 \left[\cos\left(\pi \frac{r_{ij}}{r_c}\right) + 1 \right] & \text{si } r_{ij} \leq r_c \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (10)$$

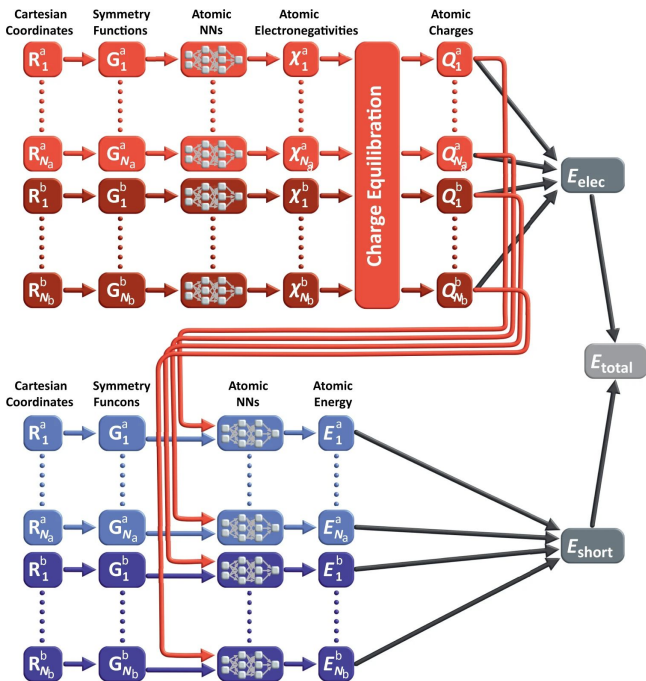
où, r_c est le rayon de coupure définissant l'environnement chimique

Propriétés



- Invariance par rotation et par translation
- Invariance par permutation des atomes d'un même élément
- Fournit une description unique des positions atomiques
- Nombre constant des valeurs des fonctions indépendant du nombre d'atomes dans la sphère de coupure





$$E_{\text{total}} = E_s + E_{\text{elec}} \quad (11)$$

la loi de Coulomb pour les systèmes non-périodiques

$$E_{\text{elec}} = \sum_i \sum_{j>i} \frac{Q_i Q_j}{R_{ij}} \quad R_{ij} = |R_i - R_j| \quad (12)$$

la sommation d'Ewald pour les systèmes périodique

$$E_{\text{elec}} = E_{\text{reel}} + E_{\text{reciproque}} + E_{\text{propre}} \quad (13)$$

Dérivation de la force

$$F_{\alpha_k, s} = - \sum_i \sum_j \frac{\partial E_{i, s}}{\partial G_{ij}} \frac{\partial G_{ij}}{\partial \alpha_k} \quad (14)$$

$$\frac{\partial E_i}{\partial G_i} = \frac{\partial f^3(x_l^3)}{\partial G_i} \cdot \sum_{k=1}^{20} a_{k1}^{23} \cdot \frac{\partial f^2(x_k^2)}{\partial G_i} \cdot \sum_{j=1}^{20} a_{jk}^{12} \cdot \frac{\partial f^1(x_j^1)}{\partial G_i} a_{ij}^{01} \quad (15)$$



Merci

pour votre aimable attention !!!

rose.youbi@facsciences-uy1.cm

