

---

## Projet n°2 : Recuit simulé

---

### 1 Introduction : le problème de Lennard Jones

L'objectif de ce projet est d'appliquer la méthode du recuit simulé pour la résolution d'un problème en géométrie moléculaire. De tels problèmes de conformation consistent à trouver les coordonnées spatiales de  $N$  atomes formant une molécule d'énergie minimale. Ils possèdent de nombreuses applications en biochimie, par exemple, pour le développement de nouveaux agents anti-cancéreux ou encore la construction d'enzymes destinées à détruire les déchets toxiques. Dans le cas du problème de Lennard Jones de taille  $N$  (en abrégé, problème  $LJ_N$ ), la force d'interaction entre deux atomes identiques distants d'une longueur  $r$  est supposée issue d'un potentiel radial dit de Van der Waals s'écrivant sous forme adimensionnée :

$$V(r) = \frac{1}{r^{12}} - \frac{2}{r^6} \quad (1)$$

La forme de ce potentiel joue un rôle important pour représenter de nombreuses molécules complexes comme les protéines ou des métaux comme l'or à basse température.

Lorsqu'une molécule est constituée de  $N$  atomes situés aux positions  $(X_1, \dots, X_N) \in \mathbb{R}^{3N}$ , son énergie potentielle totale est par définition égale à

$$LJ_N(X_1, \dots, X_N) = \sum_{i < j} V(\|X_i - X_j\|) \quad (2)$$

On peut alors montrer que la configuration la plus stable de la molécule correspond à un minimum global d'énergie potentielle. Pour une paire d'atomes, la fonction  $LJ_2$  a une forme simple (la tracer avec Scilab!) possédant une valeur minimale égale à  $-1$  obtenue pour deux atomes distants d'une longueur unité :  $\|X_2 - X_1\| = 1$ . De même, les fonctions  $LJ_3$  et  $LJ_4$  possèdent une valeur minimale facilement déterminable. Lorsque  $N > 4$ , le problème de la recherche du minimum global de  $LJ_N$  devient beaucoup plus complexe. En effet, il est conjecturé que le nombre de minima locaux de  $LJ_N$  croît exponentiellement avec  $N$ . On peut par exemple montrer que  $LJ_7$  en possède quatre et  $LJ_{55}$  plus de  $10^{10}$ , à permutations, translations et rotations près.

Le paragraphe suivant présente la méthode du recuit simulé, basée sur des tirages aléatoires permettant de rechercher le minimum d'une fonction  $J : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ . Cette méthode est ensuite appliquée au paragraphe 3 pour déterminer la configuration d'énergie minimale d'une molécule à  $N$  atomes.

### 2 Méthode du recuit simulé

Le recuit simulé est une méthode stochastique, c'est à dire incluant des tirages aléatoires, qui consiste à construire une suite  $(x_n)_{n \in \mathbb{N}}$  permettant d'approcher le minimum global de la fonction  $J : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}$ . Son principe est inspiré du procédé physique de recuit où la température d'un cristal est progressivement réduite par palliers afin d'amener celui-ci à sa structure d'énergie minimale. A température fixée, la probabilité que le système soit dans un état donné augmente lorsque l'énergie associée à cet état décroît. Ainsi, à faible température, les états de faible énergie sont de plus en plus probables. La traduction mathématique de ce procédé est la suivante :

- *Initialisation* : choix des paramètres initiaux  $R > 0$  et  $T > 0$  et tirage aléatoire de  $x_0 \in \mathbb{R}^m$ .
- *Itération  $n$*  : tirage aléatoire de  $y \in B(x_n, R)$ . Deux possibilités se présentent :

$$\begin{cases} \text{si } J(y) \leq J(x_n), \text{ alors } x_{n+1} = y \\ \text{si } J(y) > J(x_n), \text{ alors } x_{n+1} = y \text{ avec une probabilité } \exp\left(-\frac{J(y)-J(x_n)}{T}\right) \text{ ou } x_n \text{ sinon.} \end{cases}$$

- *Actualisation des paramètres* : toutes les  $Nit$  itérations,  $T \rightarrow \alpha T$  et  $R \rightarrow \alpha R$  avec  $\alpha \in ]0, 1[$ .

Bien que ne possédant pas de justification mathématique réelle, la méthode du recuit simulé permet de résoudre de nombreux problèmes d'optimisation globale pour des fonctions non forcément régulières au prix cependant d'un nombre très élevé d'évaluations de celles-ci.

1. Ecrire avec Scilab un algorithme de recuit simulé permettant de rechercher le minimum d'une fonction  $J : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  et ayant pour paramètres  $Nit$ ,  $R$ ,  $T$  et  $\alpha$ . Appliquer cette méthode pour retrouver le minimum de la fonction dite de Rastrigin à 2 variables :

$$J(x_1, x_2) = \sum_{i=1}^2 (x_i^2 - \cos(2\pi x_i)) + 2$$

sur  $[-5, 5]^2$  qui possède de nombreux minimas locaux mais un seul minimum global en  $x = (0, 0)$ . Illustrer ces résultats en montrant graphiquement comment se comporte la suite  $(x_n)$ .

### 3 Résolution du problème de Lennard Jones de taille $N$

On cherche à présent à résoudre le problème de Lennard Jones pour des valeurs de  $N$  inférieures à 20. Les cas  $N = 3$  et  $N = 4$  peuvent être facilement résolus analytiquement. Il est néanmoins intéressant d'observer comment se comporte un algorithme de recuit en partant d'une configuration totalement aléatoire :

2. Calculer de manière théorique la solution au problème dans les deux cas  $N = 3$  et  $N = 4$ . La fonction  $LJ_N$  possède-t-elle dans ce cas des minimas locaux ?
3. Utiliser la méthode du recuit simulé pour retrouver ce résultat. On veillera à utiliser les possibilités graphiques de Scilab 2D ou 3D pour illustrer les itérations de l'algorithme.

Pour les cas  $5 \leq N \leq 20$ , un recours successif à la méthode du recuit simulé puis à la routine Scilab de minimisation `optim` est nécessaire pour pouvoir approcher le minimum global de la fonction  $LJ_N$  en un temps raisonnable. La méthode exposée permet en particulier de retrouver la configuration géométrique classique de l'isocaèdre comme solution d'énergie minimale pour le problème  $LJ_{13}$ . Dans ce cas l'algorithme est initialisé avec 13 atomes placés aléatoirement dans l'hypercube  $[0, 1]^{39}$  et comporte les deux phases suivantes :

- Phase 1 (méthode du recuit simulé) On calcule  $N_{max} = 20000$  itérations avec les paramètres initiaux  $R = 0.2$ ,  $T = 1$  et un facteur de décroissance géométrique  $\alpha = 0.9$  de ceux-ci toutes les  $N = 1000$  itérations.
- Phase 2 (routine Scilab `optim`) : l'initialisation est réalisée avec la solution obtenue au terme de la phase 1.

5. Utiliser le principe précédent afin de déterminer le minimum global de la fonction  $LJ_N$  pour les valeurs de  $N$  comprises entre 5 et 20. On pourra en particulier donner les valeurs des énergies minimales obtenues en fonction de  $N$ .

6. Commenter et illustrer graphiquement les résultats pour le cas  $N = 13$ .