

Un texte, une modélisation

Laurent Dumas

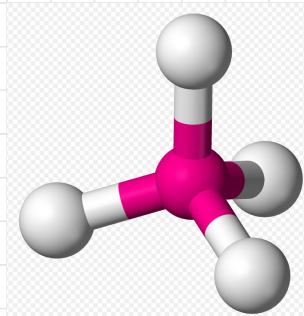
Texte : atomes et molécules

* Objectif : déterminer la position géométrique des atomes dans une molécule.

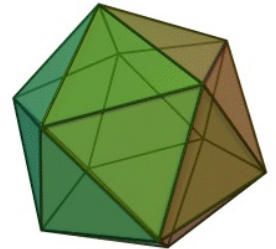
* Exemple étudié : configuration d'énergie minimale d'une molécule à N atomes ($N=3, 4, 13$, etc...)

* Outils mathématiques : optimisation, calcul différentiel, probabilités

4 atomes

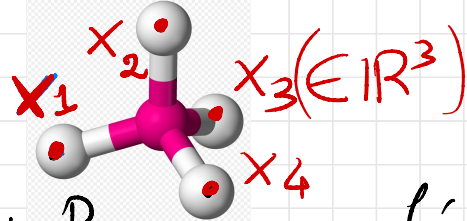
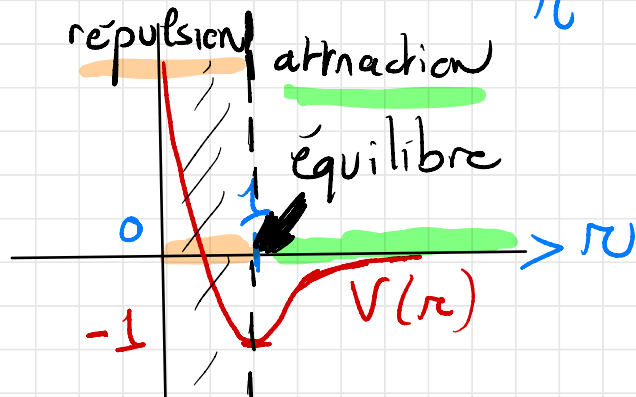


13 atomes



Etape 1: modélisation mathématique

* La force d'attraction, ou de répulsion, entre 2 atomes situés à une distance $r > 0$ dérive du potentiel de Van der Waals: $V(r) = \frac{1}{r^{12}} - \frac{2}{r^6}$



* Pour une molécule constituée de N atomes, situés aux positions $x_1, x_2, \dots, x_N$ dans $\mathbb{R}^3$, son énergie potentielle s'écrit :

$$LJ_N(x_1, \dots, x_N) = \sum_{i < j} V(\|x_i - x_j\|)$$

(fonction de Lennard Jones)

* Pour N donné, l'objectif consiste à trouver le minimum global de la fonction LJ_N .

Etape 2: une approche globale le recuit simulé

* Afin de localiser la zone
du minimum global de LJ_N ,
on utilise la méthode probabi-
-liste du recuit simulé.

* La méthode consiste à construire
la suite aléatoire suivante :

→ Initialisation :

$(X_1^0, X_2^0, \dots, X_N^0)$ tirés
aléatoirement

→ Passage de l'itération k à $k+1$:

* On perturbe aléatoirement :

$X = (X_1^k, \dots, X_N^k)$ en $Y = (Y_1, \dots, Y_N)$

→ si $LJ_N(Y_1, \dots, Y_N) < LJ_N(X_1^k, \dots, X_N^k)$,
alors $(X_1^{k+1}, \dots, X_N^{k+1}) = (Y_1, \dots, Y_N)$

↘ sinon, on garde $(Y_1, \dots, Y_N)$
avec la probabilité

$$p = \exp\left(-\frac{LJ_N(Y) - LJ_N(X)}{T_k}\right)$$

où (T_k) suite décroissant
(lentement) vers zéro.

Etape 3 : une approche locale : la méthode de gradient

* Afin de déterminer précisément la position d'énergie minimale des atomes, on utilise la méthode du gradient à pas variable.

* Cette méthode consiste à construire la suite suivante :

→ Initialisation :

$(X_1^0, \dots, X_N^0)$ obtenu après l'étape de recuit simulé

→ Passage de l'itération k à $k+1$:

* On calcule

$$G_k = \nabla_{X_1, \dots, X_N} LJ_N(X_1^k, \dots, X_N^k)$$

le vecteur gradient (dans $\mathbb{R}^{3N}$)

* En notant $X^k = (X_1^k, \dots, X_N^k)$, on a :

$$X^{k+1} = X^k - \alpha_k G_k \quad \text{ou}$$

α_k : pas de descente choisi tel que

$$LJ(X^{k+1}) < LJ(X^k) - \beta \alpha_k \|G_k\|^2$$

(condition d'Armijo)
($\beta \in]0, 1[$)

Etape 4 : simulation avec le logiciel Scilab/Python

* Gn recherche la position optimale
pour $N=3$ (triangle équilatéral)
 $N=4$ (tétraèdre régulier) et
 $N=13$ (isocaèdre régulier)

* Recuit simulé :

20 000 itérations (max)

* Gradient :

200 itérations (max)

Pour aller plus loin :

→ démonstration de la convergence de la méthode du gradient avec condition d'Armijo.

Références

- * Texte agrégation :
" Configuration des atomes "
- * Qu'est ce que la modélisation ?
www.imose.fr