

Potentiel de Lennard-Jones

- On cherche à optimiser la position de N particules dont l'énergie est donnée par un potentiel d'interaction à deux corps :

$$E(\{X_i\}_{1 \leq i \leq N}) = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} W(|X_i - X_j|).$$

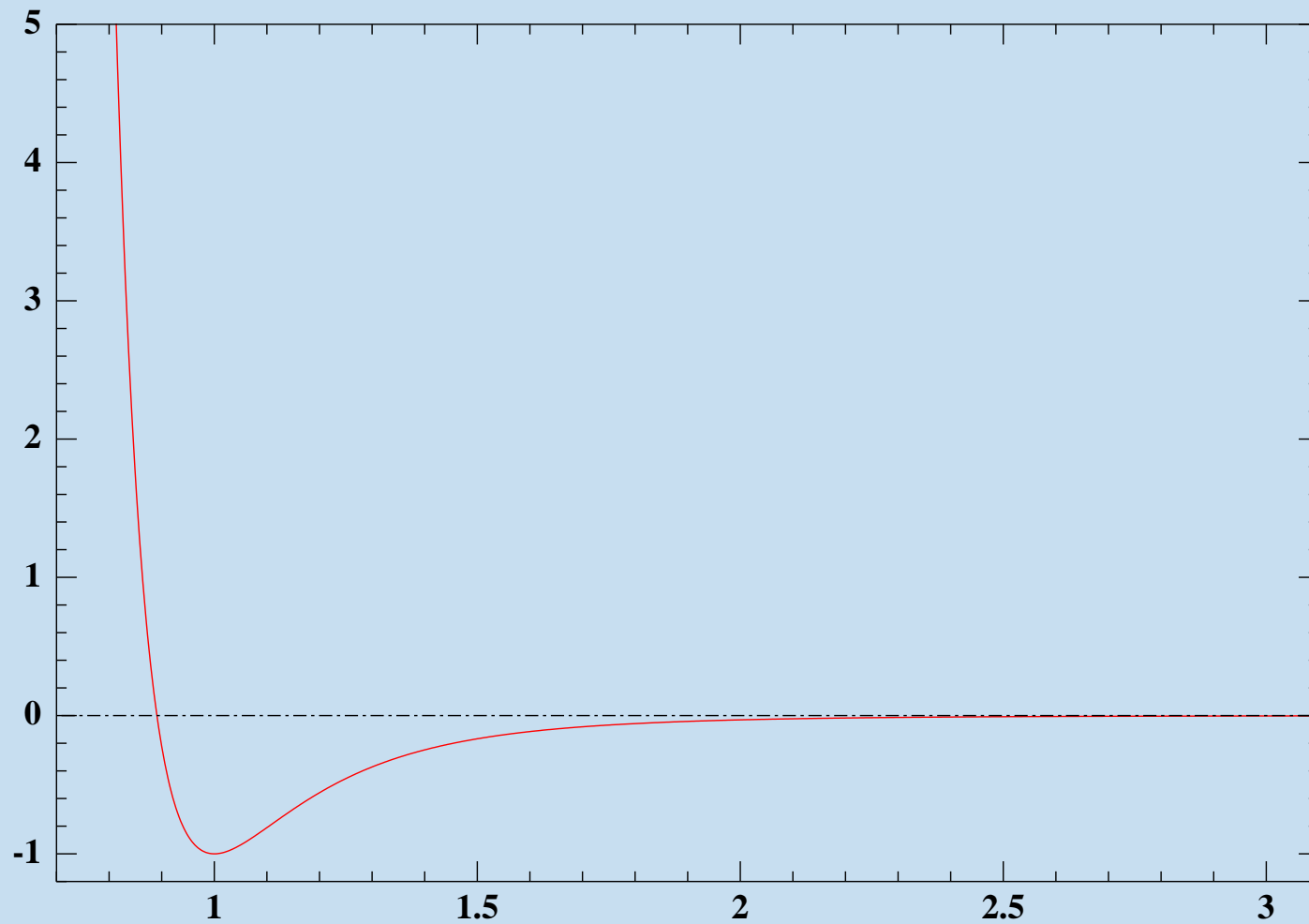
- On cherche à optimiser la position de N particules dont l'énergie est donnée par un potentiel d'interaction à deux corps :

$$E(\{X_i\}_{1 \leq i \leq N}) = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} W(|X_i - X_j|).$$

- Le potentiel W est le potentiel de Lennard-Jones :

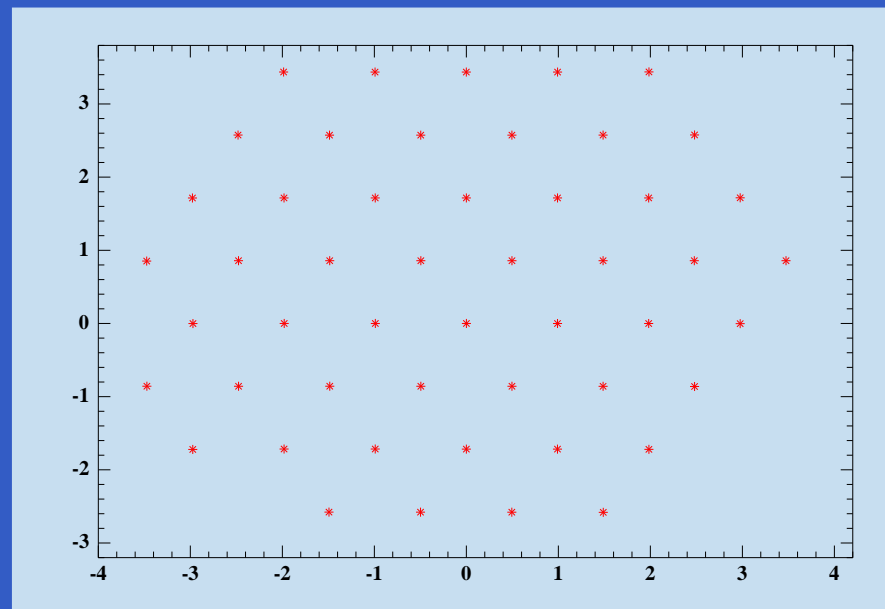
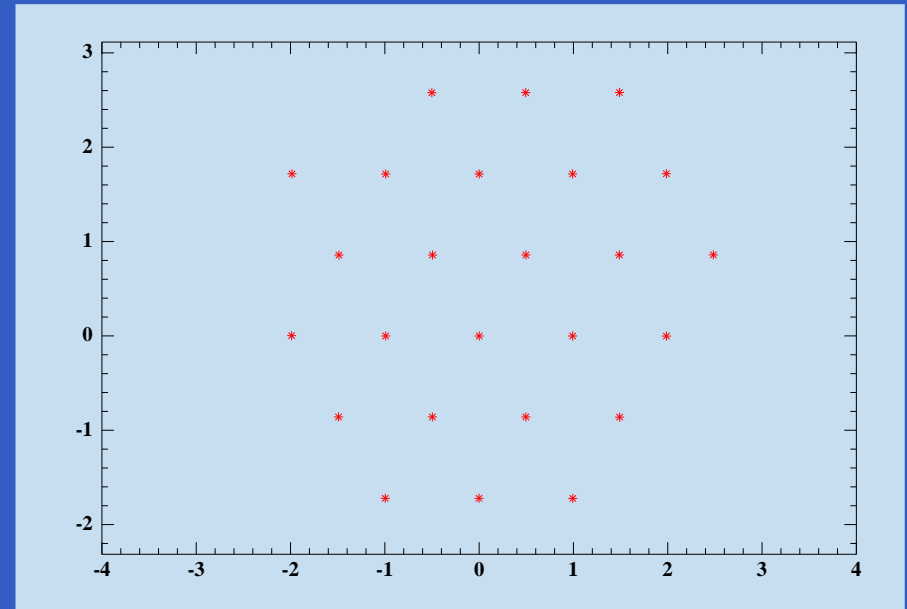
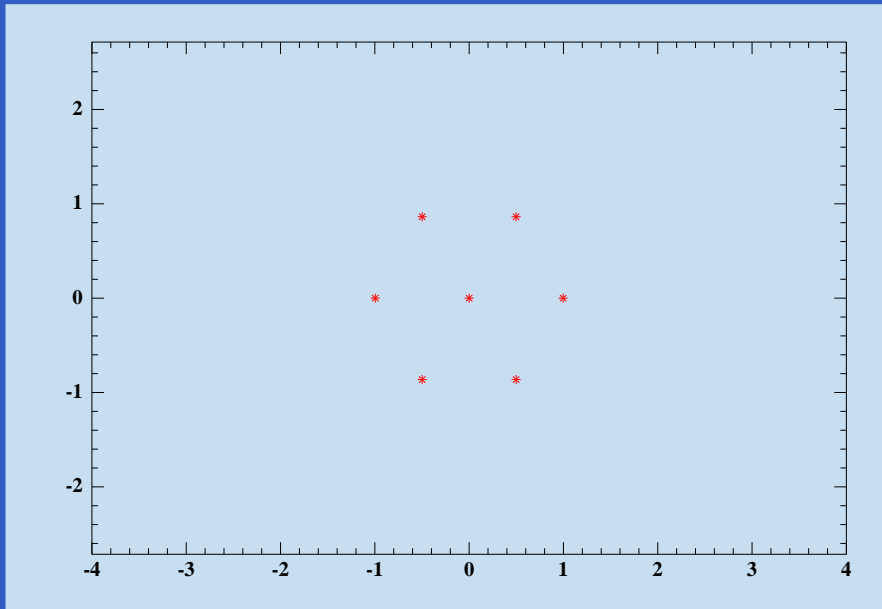
$$W(r) = \frac{1}{r^{12}} - \frac{2}{r^6}.$$

Le potentiel de Lennard-Jones



Configurations de référence C^{ref}

($N = 7, 25$ et 50)



Remarques préliminaires

- Numériquement $W'(r) = 0$ pour $r \geq 100$.

Remarques préliminaires

- Numériquement $W'(r) = 0$ pour $r \geq 100$.
- Invariances par permutation et par isométrie.

Remarques préliminaires

- Numériquement $W'(r) = 0$ pour $r \geq 100$.
- Invariances par permutation et par isométrie.
- Nombre élevé de minima locaux intrinsèques.

Remarques préliminaires

- Numériquement $W'(r) = 0$ pour $r \geq 100$.
- Invariances par permutation et par isométrie.
- Nombre élevé de minima locaux intrinsèques.
- Energie totale = \sum énergies individuelles :

$$E(\{X_i\}_{1 \leq i \leq N}) = \sum_i E_i(\{X_j\}_{j \neq i}),$$

où l'énergie d'une particule X_i est donnée par

$$E_i(\{X_j\}_{j \neq i}) = \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} W(|X_i - X_j|).$$

• *Résultats théoriques (1)*

• $\forall i \neq j, \quad \|X_i - X_j\| \geq a = 0.7286,$

• *Résultats théoriques (1)*

- $\forall i \neq j, \quad \|X_i - X_j\| \geq a = 0.7286,$
- Idées de la démonstration :

• Résultats théoriques (1)

- $\forall i \neq j, \quad \|X_i - X_j\| \geq a = 0.7286,$
- Idées de la démonstration :
 - Pour une configuration optimale (Figure).

$$\forall i \in \{1, 2, \dots, N\}, \quad E_i(\{X_j\}) < -1.$$

Résultats théoriques (1)

• $\forall i \neq j, \quad \|X_i - X_j\| \geq a = 0.7286,$

• Idées de la démonstration :

• Pour une configuration optimale (Figure).

$$\forall i \in \{1, 2, \dots, N\}, \quad E_i(\{X_j\}) < -1.$$

• Soit

$\mathcal{N}_k = \{j \neq i_0 / kr_{\min} \leq \|X_{i_0} - X_j\| < (k+1)r_{\min}\},$ et $N_k = \#\mathcal{N}_k$
avec i_0 telle que $r_{\min} = r_{\min}(i_0)$. (Figure).

Résultats théoriques (1)

• $\forall i \neq j, \quad \|X_i - X_j\| \geq a = 0.7286,$

• Idées de la démonstration :

• Pour une configuration optimale (Figure).

$$\forall i \in \{1, 2, \dots, N\}, \quad E_i(\{X_j\}) < -1.$$

• Soit

$\mathcal{N}_k = \{j \neq i_0 / kr_{\min} \leq \|X_{i_0} - X_j\| < (k+1)r_{\min}\},$ et $N_k = \#\mathcal{N}_k$
avec i_0 telle que $r_{\min} = r_{\min}(i_0)$. (Figure).

• $N_k \leq 16k + 8.$

Résultats théoriques (1)

- $\forall i \neq j, \quad \|X_i - X_j\| \geq a = 0.7286,$

- Idées de la démonstration :

- Pour une configuration optimale (Figure).

$$\forall i \in \{1, 2, \dots, N\}, \quad E_i(\{X_j\}) < -1.$$

- Soit

$\mathcal{N}_k = \{j \neq i_0 / kr_{\min} \leq \|X_{i_0} - X_j\| < (k+1)r_{\min}\},$ et $N_k = \#\mathcal{N}_k$
avec i_0 telle que $r_{\min} = r_{\min}(i_0)$. (Figure).

- $N_k \leq 16k + 8.$

- $$E_{i_0}(\{X_{i_0}\}) = \frac{1}{r_{\min}^{12}} - \frac{2}{r_{\min}^6} + \sum_{k \geq 1} \sum_{j \in \mathcal{N}_k} W_{\text{LJ}}(X_{i_0} - X_j)$$
$$\geq \frac{1}{r_{\min}^{12}} - \frac{2}{r_{\min}^6} - \left(\sum_{k \geq 1} \frac{16(2k+1)}{k^6} \right) \frac{1}{r_{\min}^6}.$$

Résultats théoriques (1)

- $\forall i \neq j, \quad \|X_i - X_j\| \geq a = 0.7286,$

- Idées de la démonstration :

- Pour une configuration optimale (Figure).

$$\forall i \in \{1, 2, \dots, N\}, \quad E_i(\{X_j\}) < -1.$$

- Soit

$\mathcal{N}_k = \{j \neq i_0 / kr_{\min} \leq \|X_{i_0} - X_j\| < (k+1)r_{\min}\},$ et $N_k = \#\mathcal{N}_k$
avec i_0 telle que $r_{\min} = r_{\min}(i_0)$. (Figure).

- $N_k \leq 16k + 8.$

- $$E_{i_0}(\{X_{i_0}\}) = \frac{1}{r_{\min}^{12}} - \frac{2}{r_{\min}^6} + \sum_{k \geq 1} \sum_{j \in \mathcal{N}_k} W_{\text{LJ}}(X_{i_0} - X_j)$$
$$\geq \frac{1}{r_{\min}^{12}} - \frac{2}{r_{\min}^6} - \left(\sum_{k \geq 1} \frac{16(2k+1)}{k^6} \right) \frac{1}{r_{\min}^6}.$$

- $1 - (2 + \alpha)t + t^2 \leq 0$ avec $\alpha = \sum \frac{16(2k+1)}{k^6},$ et $t = \frac{1}{r_{\min}^6}.$

Résultats théoriques (1)

- $\forall i \neq j, \quad \|X_i - X_j\| \geq a = 0.7286,$

- Idées de la démonstration :

- Pour une configuration optimale (Figure).

$$\forall i \in \{1, 2, \dots, N\}, \quad E_i(\{X_j\}) < -1.$$

- Soit

$\mathcal{N}_k = \{j \neq i_0 / kr_{\min} \leq \|X_{i_0} - X_j\| < (k+1)r_{\min}\},$ et $N_k = \#\mathcal{N}_k$
avec i_0 telle que $r_{\min} = r_{\min}(i_0)$. (Figure).

- $N_k \leq 16k + 8.$

- $$E_{i_0}(\{X_{i_0}\}) = \frac{1}{r_{\min}^{12}} - \frac{2}{r_{\min}^6} + \sum_{k \geq 1} \sum_{j \in \mathcal{N}_k} W_{\text{LJ}}(X_{i_0} - X_j)$$
$$\geq \frac{1}{r_{\min}^{12}} - \frac{2}{r_{\min}^6} - \left(\sum_{k \geq 1} \frac{16(2k+1)}{k^6} \right) \frac{1}{r_{\min}^6}.$$

- $1 - (2 + \alpha)t + t^2 \leq 0$ avec $\alpha = \sum \frac{16(2k+1)}{k^6}$, et $t = \frac{1}{r_{\min}^6}$.

- Enfin : $r_{\min} \geq \left(\frac{2}{2 + \alpha + \sqrt{(2 + \alpha)^2 - 4}} \right)^{1/6} \simeq 0.5185415283.$

• Résultats théoriques (2)

• $\forall i, j \in \{1, 2, \dots, N\}, \quad \|X_i - X_j\| \leq N,$

(conjecture :

$\forall i, j \in \{1, 2, \dots, N\}, \quad \|X_i - X_j\| \leq Cte \times \sqrt{N}.)$

• Résultats théoriques (2)

• $\forall i, j \in \{1, 2, \dots, N\}, \quad \|X_i - X_j\| \leq N,$

(conjecture :

$\forall i, j \in \{1, 2, \dots, N\}, \quad \|X_i - X_j\| \leq Cte \times \sqrt{N}.)$

• Idées de la démonstration : (Figure).

• *Résultats théoriques (2)*

• $\forall i, j \in \{1, 2, \dots, N\}, \quad \|X_i - X_j\| \leq N,$

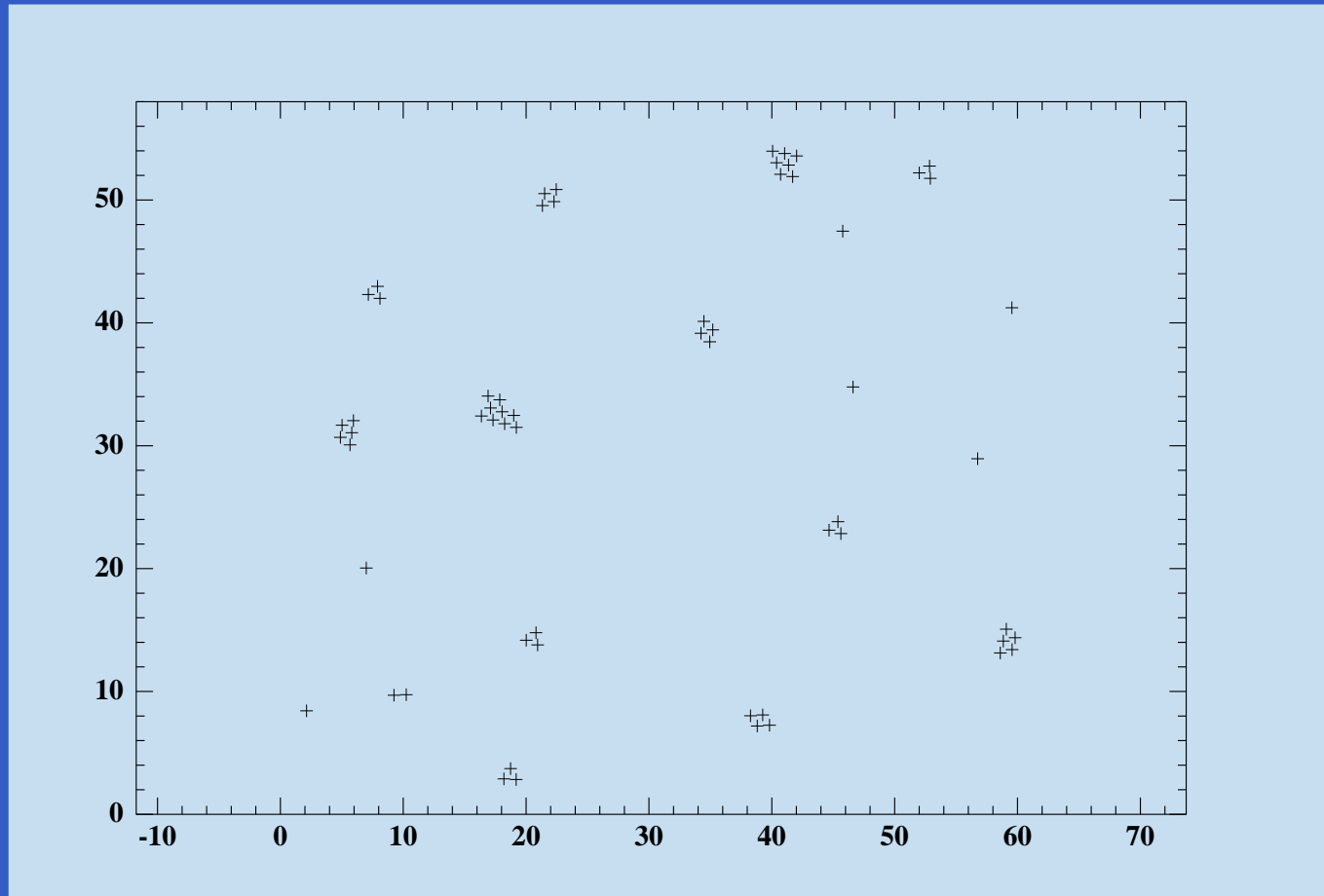
(conjecture :

$\forall i, j \in \{1, 2, \dots, N\}, \quad \|X_i - X_j\| \leq Cte \times \sqrt{N}.)$

• Idées de la démonstration : (Figure).

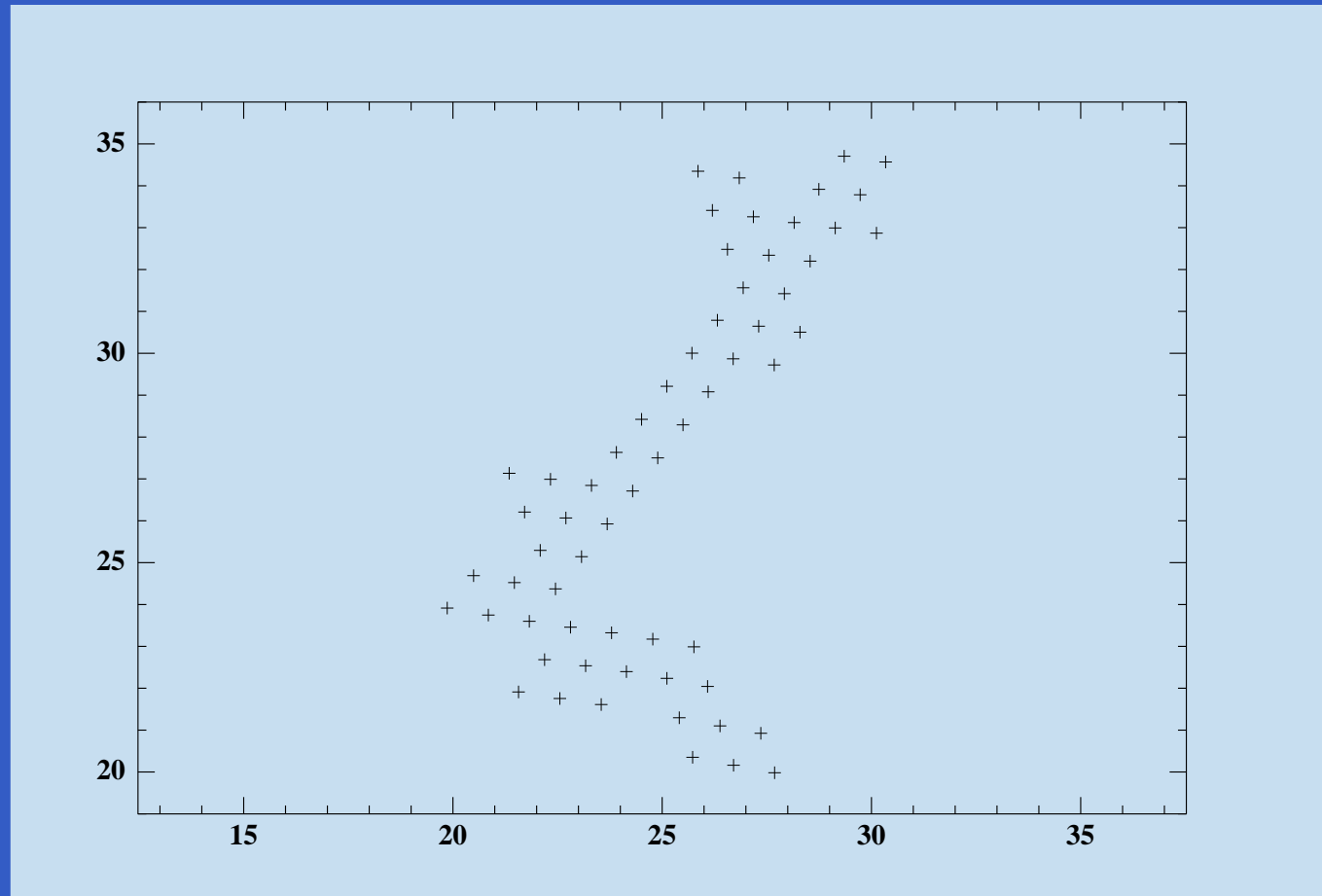
• Résultat avec gradient conjugué non linéaire

Condition initiale choisie aléatoirement



• Résultat de l'algorithme de "rapprochement"

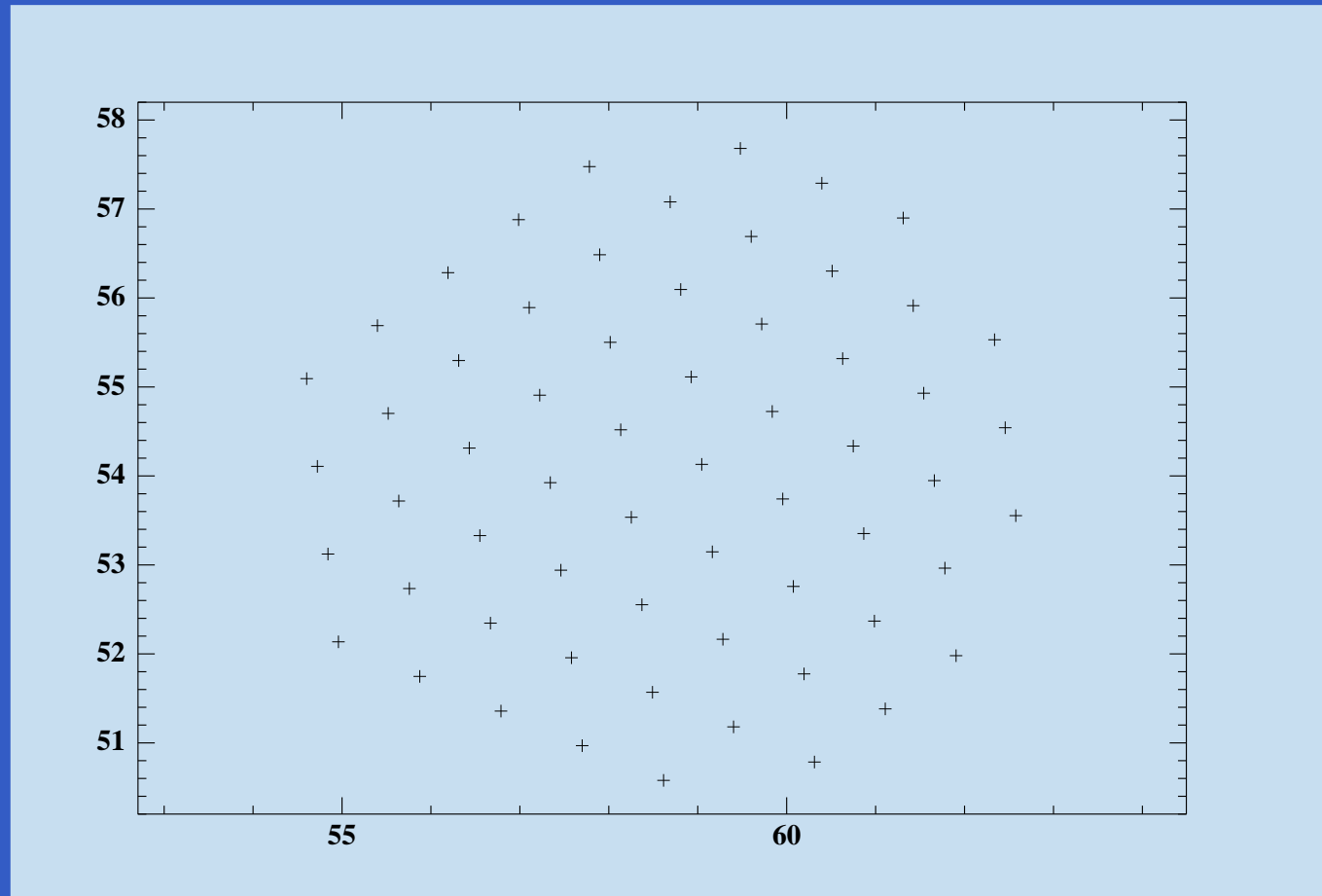
Gradient conjugué + rapprochement des blocs



• Résultat de l'algorithme de "symétrisation"

Gradient conjugué + rapprochement des blocs + procédure de

symétrie



: *Algorithme génétique (AG) : opérateurs spécifiques*

● *La fonction objectif :*

Algorithme génétique (AG) : opérateurs spécifiques

- La fonction objectif :
- pour chaque individu $\{X_j\}_{1 \leq j \leq N}$ on lance la procédure de "rapprochement" qui donne un individu $\{Y_j\}_{1 \leq j \leq N}$,

: *Algorithme génétique (AG) : opérateurs spécifiques*

● *La fonction objectif :*

- pour chaque individu $\{X_j\}_{1 \leq j \leq N}$ on lance la procédure de "rapprochement" qui donne un individu $\{Y_j\}_{1 \leq j \leq N}$,
- la fonction objectif est donnée par l'énergie de la nouvelle configuration $\{Y_j\}_{1 \leq j \leq N}$,

• *Algorithme génétique (AG) : opérateurs spécifiques*

• *La fonction objectif :*

- pour chaque individu $\{X_j\}_{1 \leq j \leq N}$ on lance la procédure de "rapprochement" qui donne un individu $\{Y_j\}_{1 \leq j \leq N}$,
- la fonction objectif est donnée par l'énergie de la nouvelle configuration $\{Y_j\}_{1 \leq j \leq N}$,
- la configuration $\{Y_j\}_{1 \leq j \leq N}$ remplace $\{X_j\}_{1 \leq j \leq N}$.

• *Algorithme génétique (AG) : opérateurs spécifiques*

• *La fonction objectif :*

- pour chaque individu $\{X_j\}_{1 \leq j \leq N}$ on lance la procédure de "rapprochement" qui donne un individu $\{Y_j\}_{1 \leq j \leq N}$,
- la fonction objectif est donnée par l'énergie de la nouvelle configuration $\{Y_j\}_{1 \leq j \leq N}$,
- la configuration $\{Y_j\}_{1 \leq j \leq N}$ remplace $\{X_j\}_{1 \leq j \leq N}$.

• *Croisement :*

• *Algorithme génétique (AG) : opérateurs spécifiques*

• *La fonction objectif :*

- pour chaque individu $\{X_j\}_{1 \leq j \leq N}$ on lance la procédure de "rapprochement" qui donne un individu $\{Y_j\}_{1 \leq j \leq N}$,
- la fonction objectif est donnée par l'énergie de la nouvelle configuration $\{Y_j\}_{1 \leq j \leq N}$,
- la configuration $\{Y_j\}_{1 \leq j \leq N}$ remplace $\{X_j\}_{1 \leq j \leq N}$.

• *Croisement :*

- Deux parents $\{X_j^1\}_{1 \leq j \leq N}$ et $\{X_j^2\}_{1 \leq j \leq N}$ définissent une configuration de $2N$ particules $\{X_j^{1,2}\}_{1 \leq j \leq 2N}$ où $X_j^{1,2} = X_j^1$ si $j \leq N$ et $X_j^{1,2} = X_{j-N}^2$ si $j > N$,

• *Algorithme génétique (AG) : opérateurs spécifiques*

• *La fonction objectif :*

- pour chaque individu $\{X_j\}_{1 \leq j \leq N}$ on lance la procédure de "rapprochement" qui donne un individu $\{Y_j\}_{1 \leq j \leq N}$,
- la fonction objectif est donnée par l'énergie de la nouvelle configuration $\{Y_j\}_{1 \leq j \leq N}$,
- la configuration $\{Y_j\}_{1 \leq j \leq N}$ remplace $\{X_j\}_{1 \leq j \leq N}$.

• *Croisement :*

- Deux parents $\{X_j^1\}_{1 \leq j \leq N}$ et $\{X_j^2\}_{1 \leq j \leq N}$ définissent une configuration de $2N$ particules $\{X_j^{1,2}\}_{1 \leq j \leq 2N}$ où $X_j^{1,2} = X_j^1$ si $j \leq N$ et $X_j^{1,2} = X_{j-N}^2$ si $j > N$,
- on supprime les N particules ayant les énergies les plus élevées,

Algorithme génétique (AG) : opérateurs spécifiques

● La fonction objectif :

- pour chaque individu $\{X_j\}_{1 \leq j \leq N}$ on lance la procédure de "rapprochement" qui donne un individu $\{Y_j\}_{1 \leq j \leq N}$,
- la fonction objectif est donnée par l'énergie de la nouvelle configuration $\{Y_j\}_{1 \leq j \leq N}$,
- la configuration $\{Y_j\}_{1 \leq j \leq N}$ remplace $\{X_j\}_{1 \leq j \leq N}$.

● Croisement :

- Deux parents $\{X_j^1\}_{1 \leq j \leq N}$ et $\{X_j^2\}_{1 \leq j \leq N}$ définissent une configuration de $2N$ particules $\{X_j^{1,2}\}_{1 \leq j \leq 2N}$ où $X_j^{1,2} = X_j^1$ si $j \leq N$ et $X_j^{1,2} = X_{j-N}^2$ si $j > N$,
- on supprime les N particules ayant les énergies les plus élevées,
- la nouvelle configuration $\{Z_j\}_{1 \leq j \leq N}$ remplace le parent $\{X_j^1\}_{1 \leq j \leq N}$.

: *AG : opérateurs spécifiques (2)*

Mutation

Deux opérateurs de mutation sont utilisés successivement.

- Premier opérateur :

AG : opérateurs spécifiques (2)

Mutation

Deux opérateurs de mutation sont utilisés successivement.

- Premier opérateur :
 - basé sur la procédure de "symétrisation",

AG : opérateurs spécifiques (2)

Mutation

Deux opérateurs de mutation sont utilisés successivement.

- Premier opérateur :
 - basé sur la procédure de "symétrisation",
 - l'axe de symétrie est défini par deux particules X_i et X_j choisies aléatoirement dans la configuration $\{X_j\}_{1 \leq j \leq N}$.

AG : opérateurs spécifiques (2)

Mutation

Deux opérateurs de mutation sont utilisés successivement.

- Premier opérateur :
 - basé sur la procédure de "symétrisation",
 - l'axe de symétrie est défini par deux particules X_i et X_j choisies aléatoirement dans la configuration $\{X_j\}_{1 \leq j \leq N}$.

- Second opérateur :

AG : opérateurs spécifiques (2)

Mutation

Deux opérateurs de mutation sont utilisés successivement.

- Premier opérateur :
 - basé sur la procédure de "symétrisation",
 - l'axe de symétrie est défini par deux particules X_i et X_j choisies aléatoirement dans la configuration $\{X_j\}_{1 \leq j \leq N}$.
- Second opérateur :
 - utilisé uniquement à la fin de l'algorithme dans le but d'améliorer la convergence,

AG : opérateurs spécifiques (2)

Mutation

Deux opérateurs de mutation sont utilisés successivement.

- Premier opérateur :
 - basé sur la procédure de "symétrisation",
 - l'axe de symétrie est défini par deux particules X_i et X_j choisies aléatoirement dans la configuration $\{X_j\}_{1 \leq j \leq N}$.
- Second opérateur :
 - utilisé uniquement à la fin de l'algorithme dans le but d'améliorer la convergence,
 - son rôle est d'éviter les minima locaux de basse énergie,

: AG : opérateurs spécifiques (2)

Mutation

Deux opérateurs de mutation sont utilisés successivement.

- Premier opérateur :
 - basé sur la procédure de "symétrisation",
 - l'axe de symétrie est défini par deux particules X_i et X_j choisies aléatoirement dans la configuration $\{X_j\}_{1 \leq j \leq N}$.
- Second opérateur :
 - utilisé uniquement à la fin de l'algorithme dans le but d'améliorer la convergence,
 - son rôle est d'éviter les minima locaux de basse énergie,
 - l'idée principale est d'optimiser les positions des particules sur le bord.

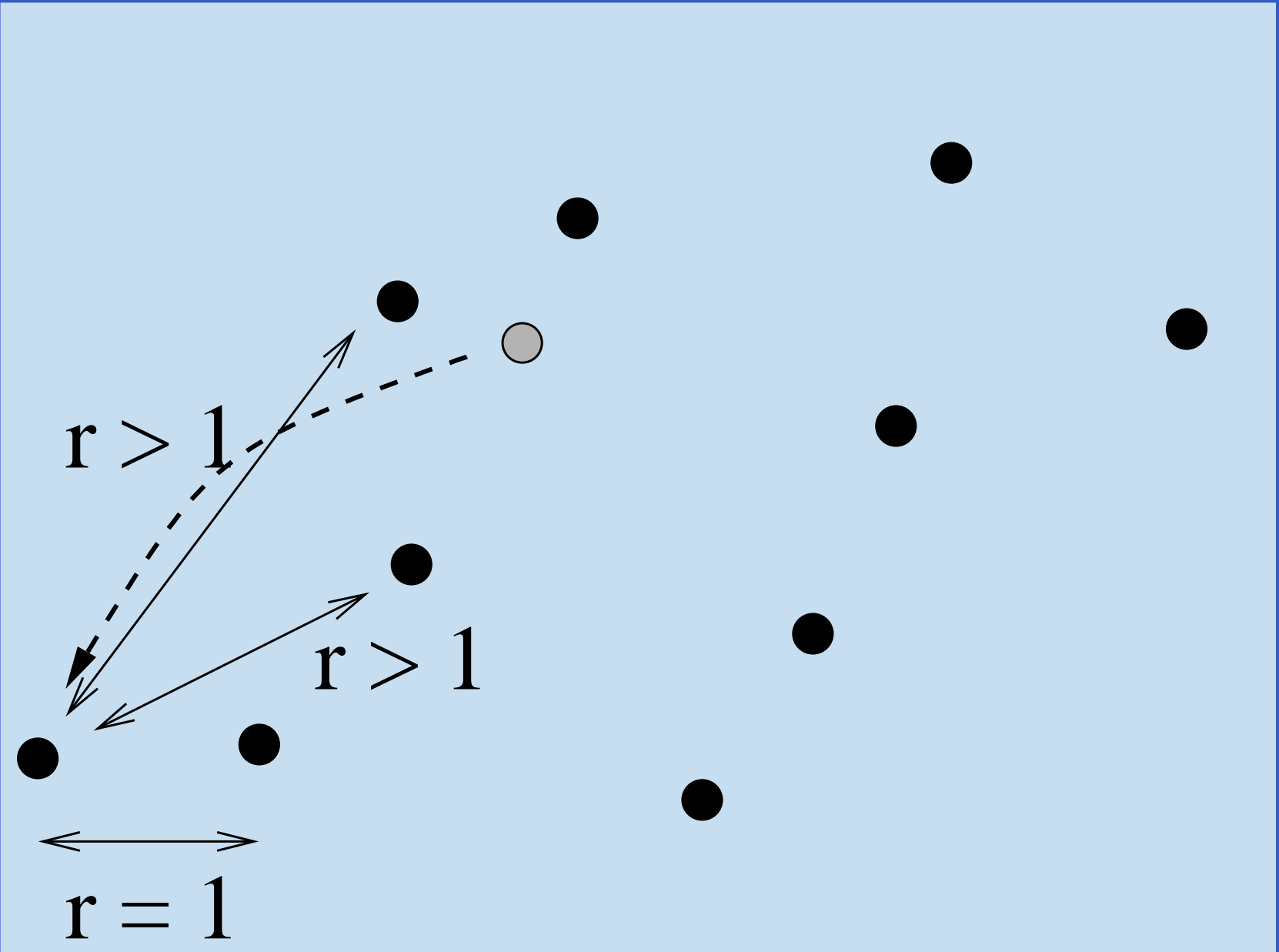
Résultats

N	50	100	200
Energie de C^{ref}	-137.48998	-293.69715	-613.66974
Espace de recherche	$[-25, 25]^{100}$	$[-50, 50]^{200}$	$[-100, 100]^{400}$
"Symétrisation": énergie obtenue	-136.591574	-292.891543	-612.158901
"Symétrisation": temps ^(a)	4mn	38mn	6h 23mn
AG: énergie obtenue	-137.48998	-293.69715	-613.05640
AG: temps ^(b)	7mn	25mn	> 3j

^(a) Temps CPU

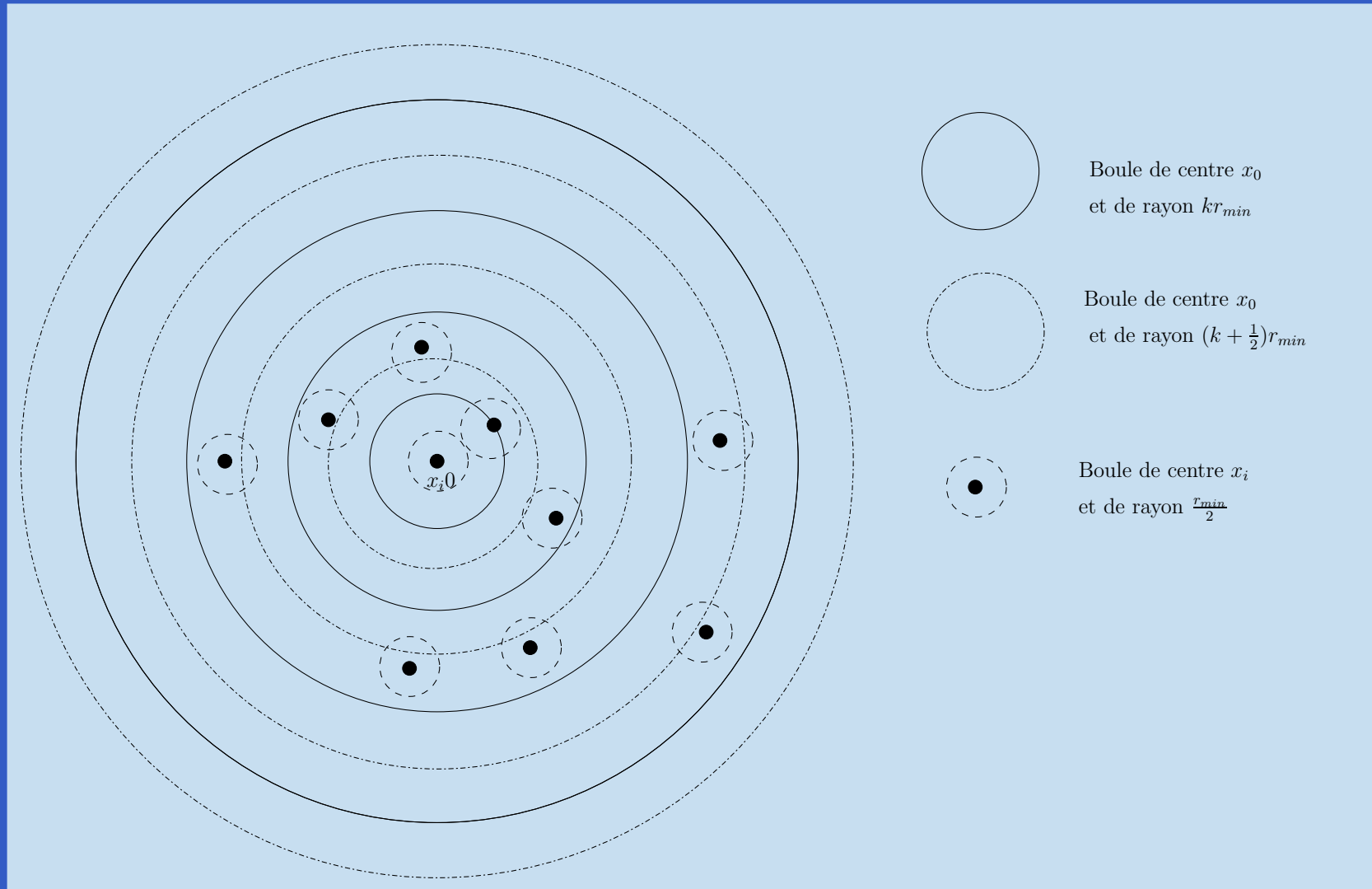
^(b) Temps utilisateur d'un calcul sur 10 processeurs parallèles

· Résultats théoriques (1) : Etape 1



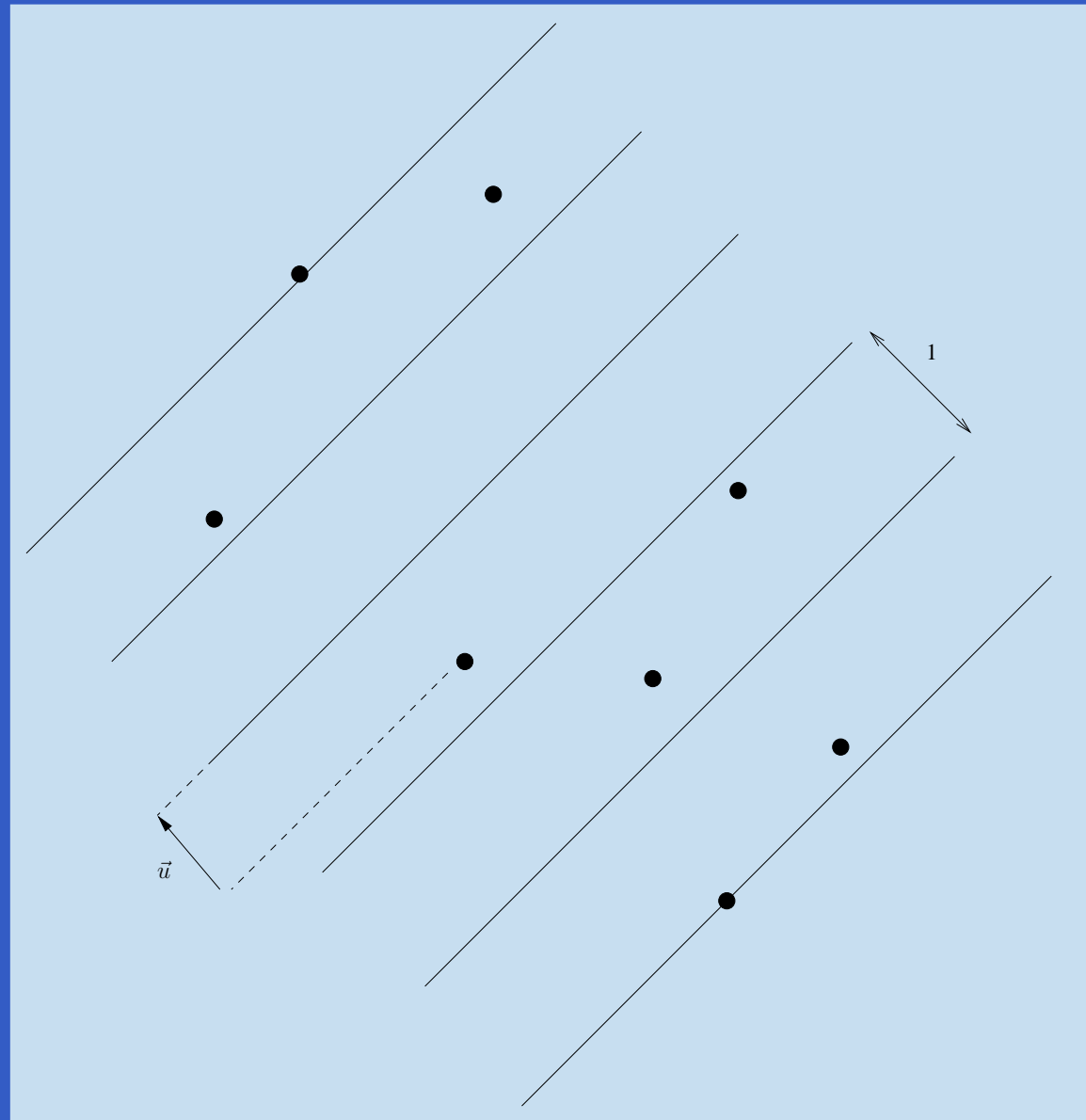
Retour.

• Résultats théoriques (1) : Etape 2



Retour.

• Résultats théoriques (2)



Retour.