

Recherche de conformation de molécule par système multi-agent coopératif

Camille Besse

Institut de Recherche en Informatique de Toulouse
besse@irit.fr

Colline
Jeudi 19 Mai 2005

UNIVERSITE
PAUL
SABATIER



TOULOUSE III

Description du Système

La molécule

- Objectif : minimiser son énergie
- Environnement : aucun
- Composée d'atome : les agents

Description du Système

La molécule

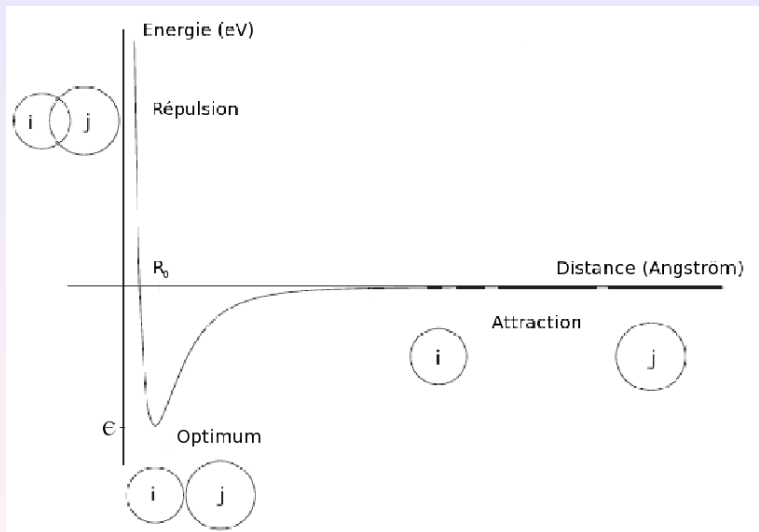
- Objectif : minimiser son énergie
- Environnement : aucun
- Composée d'atome : les agents

Les atome-agents

- Caractéristiques : position 3D, type, liaisons covalentes.
- Compétences : Changer de position 3D
- Interactions au travers du potentiel de Lennard-Jones
- Perpétuellement en situation non-coopérative à la recherche de l'équilibre dynamique

Description du Système

Potentiel de Lennard-Jones



Description du Système

Cycle des atomes-agents

Perception

- Percevoir le **pire covalent** : celui dont l'erreur cumulée sur ses liaisons covalentes est la plus grande
- Percevoir le **pire voisin** : celui dont l'énergie potentielle est la plus grande

Description du Système

Cycle des atomes-agents

Perception

- Percevoir le **pire covalent** : celui dont l'erreur cumulée sur ses liaisons covalentes est la plus grande
- Percevoir le **pire voisin** : celui dont l'énergie potentielle est la plus grande

Décision

- Choisir de se déplacer pour son pire covalent en réduisant l'erreur de celui-ci

Description du Système

Cycle des atomes-agents

Perception

- Percevoir le **pire covalent** : celui dont l'erreur cumulée sur ses liaisons covalentes est la plus grande
- Percevoir le **pire voisin** : celui dont l'énergie potentielle est la plus grande

Décision

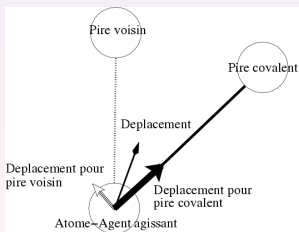
- Choisir de se déplacer pour son pire covalent en réduisant l'erreur de celui-ci
- Choisir de se déplacer pour son pire voisin perpendiculairement au déplacement vers le pire covalent de manière à diminuer l'énergie de l'interaction avec le pire voisin

Description du Système

Cycle des atomes-agents

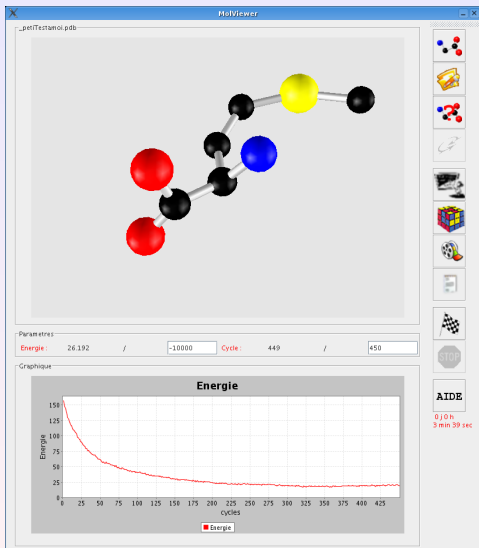
Action

- Effectuer un déplacement élémentaire suivant la direction de son pire covalent
- Effectuer un déplacement élémentaire suivant la direction de la perpendiculaire au déplacement ci-dessus dans le sens du pire voisin
- Vérifier que ces déplacements n'induisent pas de cycle et bloquer temporairement les déplacements éventuellement



Résultats

Interface



Résultats

Performances

Performances

Nombre d'atomes	Nombre de cycles	Temps écoulé
5	≈ 500	1 min 10
9	≈ 900	5 min 30
13	≈ 1300	9 min 20
17	≈ 1700	19 min 50
42	≈ 3500	≈ 7 h
82	???	déjà 1 jour de passé

Résultats

Résultats

Points forts & points faibles

- ✓ Pas de blocage dans un *minimum local*
- ✓ Résolution en nombre de pas *linéaire*
- ✓ Pas besoin de modéliser la fonction *globale*

Résultats

Points forts & points faibles

- ✓ Pas de blocage dans un *minimum local*
- ✓ Résolution en nombre de pas *linéaire*
- ✓ Pas besoin de modéliser la fonction *globale*
- ✗ Résolution en temps *exponentiel*
- ✗ Défauts de la modélisation de *toutes* les interactions
- ✗ Ignorance des fonction de Lennard-Jones mais ...

Résultats

Points forts & points faibles

- ✓ Pas de blocage dans un *minimum local*
- ✓ Résolution en nombre de pas *linéaire*
- ✓ Pas besoin de modéliser la fonction *globale*
- ✗ Résolution en temps *exponentiel*
- ✗ Défauts de la modélisation de *toutes* les interactions
- ✗ Ignorance des fonction de Lennard-Jones mais ...

... on va les leur apprendre !!!