

# DÉVELOPPEMENT D'UN RÉSEAU DE NEURONES PRENANT EN COMPTE LES EFFETS DIRECTIONNELS, LA CHARGE, LE SPIN ET LES EFFETS NON LOCAUX

**LABORATORY :** Institut Lumière Matière

**LEVEL :** M1 / M2

**TEAM(S) :** THEOCHEM

**CONTACT(S) :** ALLOUCHE Abdul rahman

**CONTACT(S) DETAILS:** [abdul-rahman.allouche\[at\]univ-lyon1.fr](mailto:abdul-rahman.allouche[at]univ-lyon1.fr) /

**KEYWORD(S) :** Message Passing Neural Networks / MPNN / Effets non linéaires

## SCIENTIFIC CONTEXT :

Les réseaux de neurones de passage de messages (Message Passing Neural Networks, MPNN) sont largement utilisés pour prédire les propriétés physiques et chimiques et accélérer les études en dynamique moléculaire. Bien qu'ils soient adaptés à de grands ensembles de données, les approches précédentes sont moins efficaces avec de petites bases de données comparées aux méthodes d'apprentissage automatique basées sur les noyaux (kernel methods). Une limitation importante réside dans les représentations invariantes. Pour y remédier, il est crucial d'intégrer, en plus des distances interatomiques, les informations sur les directions relatives des atomes [1].

Une autre limitation des champs de force MPNN est l'ignorance de la charge de la molécule et de sa multiplicité, ce qui restreint leur utilisation aux systèmes non chargés et singulets. Il est donc nécessaire de développer une approche prenant en compte ces deux propriétés moléculaires afin de pouvoir prédire les propriétés de systèmes chargés.

Un autre aspect souvent négligé dans la plupart des modèles MPNN est l'absence de prise en compte des effets non locaux. Certaines approches MPNN [2,3] intègrent ces effets, mais en utilisant des expressions empiriques pour certaines interactions entre atomes. Développer un modèle qui considère ces effets sans recourir à des formules empiriques constituerait une avancée majeure dans le développement d'un MPNN pour la prédiction des propriétés chimiques et physiques de tout type de système.

## MISSIONS :

Après une étude bibliographique, l'étudiant(e) ajoutera au code développé [4] dans l'équipe les méthodes suivantes :

- La prise en compte des directions dans le passage de messages.
- L'intégration d'un réseau de neurones pour traiter les effets non locaux, dans un premier temps à l'aide de potentiels empiriques.
- L'intégration d'un réseau de neurones pour traiter les effets non locaux de manière non empirique.

Après chaque implémentation, l'étudiant(e) testera le code en utilisant des bases de données, où l'effet de la charge (C10H2/C10H3+, Na8Cl8+, Ag3+/-) ou de la non-linéarité du problème (Au2-MgO) sera mis en évidence.

L'étudiant(e) doit maîtriser la programmation en Python. Des connaissances en Deep Learning seraient un atout.

## OUTLOOKS :

Le projet pourra être poursuivi en thèse si une bourse de l'école doctorale est obtenue.

## BIBLIOGRAPHY :

- [1] Kristof Schütt, et al.; Proceedings of the 38th International Conference on Machine Learning, PMLR 139:9377-9388, <http://proceedings.mlr.press/v139/satorras21a/satorras21a.pdf>
- [2] Unke, O.T., et al.; Nat Commun 12, 7273 (2021). <https://doi.org/10.1038/s41467-021-27504-0>
- [3] Ko, T.W., Finkler, J.A., Goedecker, S. et al.; Nat Commun 12, 398 (2021). <https://doi.org/10.1038/s41467-020-20427-2>
- [4] NNMP-Pot :<https://github.com/alloucheat/NNMP-Pot>