UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE INGENIERÍA

Inteligencia artificial en la predicción de fuerzas interatómicas

TESIS

Que para obtener el título de

Ingeniero en Computación

P R E S E N T A

Yardiel Bonilla Galicia

DIRECTOR DE TESIS

Dr. Ruben Santamaría Ortiz

Ciudad Universitaria, Cd. Mx., 2024

Agradecimientos

Agradezco a mis padres, quienes siempre me han brindado su apoyo incondicional a lo largo de este camino. Su confianza en mí y su constante ayuda han sido fundamentales para que pudiera completar mis estudios.

Agradezco profundamente a mis hermanos por su apoyo incondicional a lo largo de toda mi trayectoria académica, así como por los valiosos consejos que me han brindado para enfrentar la vida.

Finalmente, quiero expresar mi más sincero agradecimiento al Dr. Rubén Santamaria Ortiz por su excepcional orientación durante la realización de este trabajo. Su constante atención y disposición para ofrecerme su apoyo han sido esenciales para esta tesis.

Índice general

Índice de figuras

Índice de cuadros

Capítulo 1

Introducción

1.1. Objetivo de la tesis

El objetivo de este trabajo es generar una red neuronal artificial(RNA) con la capacidad de predecir el cálculo de las fuerzas de Coulomb y las fuerzas de Lennard-Jones entre moléculas de agua con mínimas perturbaciones, con la expectativa de obtener un error aceptable en las predicciones. La meta es desarrollar una metodología simple que disminuya el tiempo, así como la dependencia computacional entre el hardware y los cálculos efectuados a la hora de obtener estas fuerzas a gran escala.

1.2. Definición del problema

El agua, al tener una configuración química relativamente simple, resulta fácil de emplear en cualquier medio, ya sea para generar energía, como medio de disolución, cambiar su estado, etc. Aunque existen elementos químicos con una configuración atómica aún más sencilla, el agua es considerada como el disolvente universal debido a su capacidad de formar puentes de hidrógeno con otras sustancias, como alcoholes, azúcares y proteínas.

Pese a que el agua es un fluido simple, surgen ciertos inconvenientes cuando se quiere analizar su comportamiento a gran escala. El cálculo de las fuerzas internas experimenta un crecimiento desproporcionado, lo que genera algunas complicaciones. Uno de estos problemas se relaciona con el hardware empleado para realizar el cálculo, ya que cabe la posibilidad de que este no sea capaz de ejecutar un sistema de tal magnitud. Otro problema aparece cuando el hardware, sí puede ejecutar el sistema de aguas, pero el tiempo requerido para obtener un resultado es imposible de atender.

1.3. Método

Se implementarán una serie de procedimientos sobre las posiciones x, y, z de las moléculas de agua, al igual que con los resultados obtenidos de calcular las fuerzas inter-atómicas, con el fin de extraer patrones similares entre estos dos datos (de tal forma que el primero genere al segundo). Estos datos serán el punto de partida para alimentar un modelo de RNA.

El primer paso será dividir las moléculas de agua que se encuentran dentro de nuestro contenedor en pequeños vecindarios(mediante la idea de dividir y conquistar). Esto permitirá reducir el tiempo de análisis, ya que no será necesario pasar por cada uno de los átomos calculando cada una de las fuerzas, dado que cada átomo percibe su entorno de manera diferente. Cada cúmulo tendrá la capacidad de describir todo el contenedor al seleccionar solo aquellos átomos de mayor interacción respecto a un átomo central. Posteriormente, se implementarán técnicas de rotación y traslación en los ejes de las aguas, así como la conversión de sus coordenadas cartesianas en coordenadas polares. Luego, se buscará aplicar filtros (como el de suavizado y resalte de bordes) para conseguir imágenes con ciertas similitudes entre sí. Además, se transformarán las fuerzas resultantes de estas posiciones para convertirlas en un sistema de posicionamiento binario, facilitando así la implementación de una RNA.

1.4. Estado del arte

Las Redes Neuronales Artificiales (RNAs) han experimentado una amplia difusión y se utilizan en prácticamente todos los campos del conocimiento debido a sus destacadas características de rapidez, sencillez de implementación y capacidad de adaptación. Aunque uno de los mayores inconvenientes de las RNAs es la cantidad de energía requerida para entrenar cualquier modelo, el continuo avance tecnológico en el hardware ha permitido que estas redes sean cada vez más eficaces.

En el artículo (Thomas Plé [30]) presenta una explicación clara sobre el alto consumo computacional que llegan a tener este tipo de cálculos (Coulomb, Lennard-Jones). Además, se destaca la importancia de llevar a cabo un preprocesamiento de los datos. El enfoque utilizado en la construcción de una RNA se basa en el uso de imágenes, como mapas de calor, con el propósito de simplificar la comprensión de los datos y mejorar la precisión de las predicciones.

En (Christian Devereux,2023 [31]) se aborda la construcción de los vectores de entrada para las RNAs, donde se explican las ventajas y los inconvenientes de emplear las coordenadas cartesianas, así como realizar rotaciones sobre estas. También se presenta el modelo conocido como alimentación hacia adelante (feed forward), que aunque no es un sistema tan potente, siempre es un buen inicio para este tipo de datos. Se explica que la predicción mediante las fuerzas tiene una mayor precisión respecto al cálculo de las energías. El error de aplicar el cálculo de las fuerzas surge debido al incremento de las distancias respecto a los puntos de anclaje (punto de referencia).

En (F. Bivort Haiek,2022 [32]) se aborda el tema de la generación de un vecindario como sistema de limpieza, enfocado en seleccionar únicamente aquellos átomos donde exista una aglomeración con mayor intensidad. Además, se discute la dificultad a la hora de diseñar una RNA, ya que no hay un punto de referencia cuando se buscan métricas de error en los datos que deseamos predecir.

Finalmente en (García Cabello, J., 2022 [3]), (Kiprono Elijah Koech, 2022 [4]), (Goldstein .H, 2014 [5]) y (Gonzalez .R, 2018 [6]) se discute la metodología matemática necesaria para realizar una RNA. Asimismo, en (Ruben Santamaria O., 2023 [1]) se explica, de una manera más rigurosa, la dinámica molecular entre los átomos. Utilizando estos conceptos, se puede crear una RNA que tenga unos resultados con una mayor probabilidad de éxito. Aunque existen múltiples formas de diseñar u optimizar una RNA, encontrar un modelo especifico para un tipo de datos aún se debe realizar a prueba y error.

Capítulo 2

Interacciones Atómicas

2.1. Fuerzas de Coulomb

Cada cuerpo en el espacio está sujeto a una interacción con los demás objetos que lo rodean. La forma en como se relacionan dichos objetos depende de la carga eléctrica que posea cada uno en ese momento.

Coulomb establece que la fuerza eléctrica de interacción entre dos partículas cargadas en reposo tiene las siguientes propiedades:

- La fuerza entre las dos partículas es inversamente proporcional al cuadrado de la separación entre ellas, denotado con la letra r.
- La fuerza es proporcional al producto de las cargas q1 y q2 de las partículas.
- La fuerza atrae a las partículas si las cargas son de signo opuesto y las rechaza si las cargas tienen el mismo signo.

La ecuación de la fuerza de Coulomb entre las partículas 1 y 2 es:

$$F(r) = (1/4\pi\epsilon)(q_1 q_2 / r_{12}^2) \tag{2.1.1}$$

Donde ϵ se le conoce como la constante eléctrica, la cual depende del medio donde se encuentre.

En su forma vectorial, la fuerza de Coulomb se puede escribir como:

$$\begin{aligned} &F(r) = \tfrac{1}{4\pi\epsilon}\tfrac{q_1 q_2}{|r_{12}|^2}\,\hat{\mathbf{r}}_{12} \quad ; \quad \hat{\mathbf{r}}_{12} = \tfrac{\vec{r}_{12}}{|\vec{r}_{12}|} \quad ; \quad \vec{r}_{12} = (\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \quad ; \quad \vec{r}_1 = (x_1, y_1, z_1) \\ &\therefore \quad F(r) = \tfrac{1}{4\pi\epsilon}\tfrac{q_1 q_2}{|r_{12}|^3}\,\vec{\mathbf{r}}_{12} \\ &F_x(r) = \tfrac{1}{4\pi\epsilon}\tfrac{q_1 q_2}{|r_{12}|^3}\,x_{12} \quad ; \quad F_y(r) = \tfrac{1}{4\pi\epsilon}\tfrac{q_1 q_2}{|r_{12}|^3}\,y_{12} \quad ; \quad F_z(r) = \tfrac{1}{4\pi\epsilon}\tfrac{q_1 q_2}{|r_{12}|^3}\,z_{12} \end{aligned} \tag{2.1.2}$$

En la mayoría de las ocasiones, un sistema contiene muchas partículas. Entre estas partículas, la fuerza electromagnética presenta una forma similar a la de la gravedad, lo que quiere decir que tiene un alcance infinito, el cual se debilita con la distancia, pero es lo suficientemente

lento como para que las partículas muy lejanas aún lo sientan, lo que nos obliga a tomar en cuenta cada una de las partículas que se encuentren en el medio. A pesar de ello, las interacciones de Coulomb mantienen un carácter aditivo por pares de las interacciones. Por ejemplo, la fuerza de Coulomb sobre la partícula 1 queda definida por la fuerza 1, 2, etc.

$$\begin{aligned} F_1(r) &= \tfrac{1}{4\pi\epsilon}\tfrac{q_1q_2}{|r_{12}|^3}\ \vec{\mathbf{r}}_{12} + \tfrac{1}{4\pi\epsilon}\tfrac{q_1q_3}{|r_{13}|^3}\ \vec{\mathbf{r}}_{13} + \tfrac{1}{4\pi\epsilon}\tfrac{q_1q_4}{|r_{14}|^3}\ \vec{\mathbf{r}}_{14} + \cdots \\ F_2(r) &= \tfrac{1}{4\pi\epsilon}\tfrac{q_1q_2}{|r_{21}|^3}\ \vec{\mathbf{r}}_{21} + \tfrac{1}{4\pi\epsilon}\tfrac{q_2q_3}{|r_{23}|^3}\ \vec{\mathbf{r}}_{23} + \tfrac{1}{4\pi\epsilon}\tfrac{q_2q_4}{|r_{24}|^3}\ \vec{\mathbf{r}}_{24} + \cdots \end{aligned} \tag{2.1.3}$$

El desplazamiento de la partícula 1 está dada por la fuerza $\mathbf{F}_1$. De igual forma se obtiene el desplazamiento de la partícula 2, 3, etc. Todo esto ocurre al tiempo, digamos t_1. Para denotar la dependencia en el tiempo, escribimos la ecuación 2.1.3 en términos de t_1.

$$F_1(r(t_1)) = \tfrac{1}{4\pi\epsilon}\tfrac{q_1q_2}{|r_{12}|^3}\ \vec{\mathbf{r}}_{12}(t_1) + \tfrac{1}{4\pi\epsilon}\tfrac{q_1q_3}{|r_{13}|^3}\ \vec{\mathbf{r}}_{13}(t_1) + \tfrac{1}{4\pi\epsilon}\tfrac{q_1q_4}{|r_{14}|^3}\ \vec{\mathbf{r}}_{14}(t_1) + \cdots \tag{2.1.4}$$

En un instante de tiempo posterior t_2 el nuevo desplazamiento de la partícula 1 está dada por $F_1(r(t_2))$.

$$F_1(r(t_2)) = \tfrac{1}{4\pi\epsilon}\tfrac{q_1q_2}{|r_{12}|^3}\ \vec{\mathbf{r}}_{12}(t_2) + \tfrac{1}{4\pi\epsilon}\tfrac{q_1q_3}{|r_{13}|^3}\ \vec{\mathbf{r}}_{13}(t_2) + \tfrac{1}{4\pi\epsilon}\tfrac{q_1q_4}{|r_{14}|^3}\ \vec{\mathbf{r}}_{14}(t_2) + \cdots \tag{2.1.5}$$

Y así mismo para las demás partículas.

2.2. Fuerzas de Lennard-Jones

Las partículas experimentan fuerzas y energías en un cúmulo de moléculas. Dependiendo de la carga de las partículas, se establecerá una atracción o repulsión electrostática entre ellas. Así, para evitar que, por ejemplo, un par de partículas lleguen a contacto pleno cuando sus cargas son opuestas, o para evitar que se alejen hasta el infinito una de otra cuando sus cargas son iguales, se introduce el potencial de interacción de Lennard - Jones (LJ).

La función que describe el comportamiento suave de repulsión y atracción es la siguiente:

$$\mathbf{V}_{LJ}(r) = 4e[(\sigma/r)^{12} - (\sigma/r)^6] \tag{2.2.1}$$

Donde r es la distancia que existe entre un par de partículas, σ es una distancia de referencia, y e es una energía de referencia, cuyos valores dependerán del tipo de átomos interactuantes con los que se estén trabajando. El primer término de la ecuación introduce una energía de repulsión entre las partículas. Dicho término va disminuyendo de forma gradual hasta aproximarse a cero.

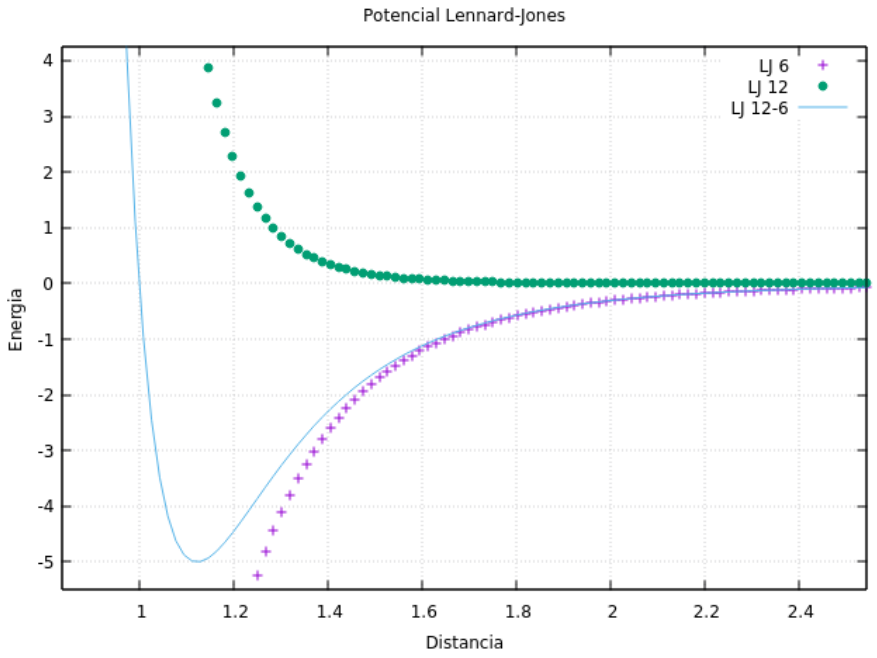
$$\sigma/r^{12} \tag{2.2.2}$$

El segundo término describe la energía de atracción debido al signo negativo de esta contribución. Dicho término provoca que las partículas se aproximen entre ellas.

$$-\sigma/r^6 \tag{2.2.3}$$

La unión de las contribuciones anteriormente mencionadas, es decir σ/r^{12} y $-\sigma/r^{6}$, describe el equilibrio electrostático entre las dos partículas, como se muestra en la gráfica 2.2.1. Este equilibro se consigue a partir de la intersección de las energías de los cuerpos cuando se encuentran en un mínimo de energía, si una partícula se repele está al mismo tiempo generará una energía de atracción que evitará su desprendimiento, en el caso contrario si una partícula se atrae, está generará una energía de repulsión que evitará el choque. La gráfica subsecuente describe este comportamiento en términos numéricos.

Figura 2.2.1: Gráfica de las energías de Lennard-Jones



Para obtener la fuerza que ejercen las partículas entre sí es necesario derivar la ecuación 2.2.1 en términos de la distancia. Por regla de la cadena.

$$F = -\frac{dV(r)}{dx} = -\frac{dV(r)}{dr}\ \frac{dr}{dx} \tag{2.2.4}$$

Calculando el primer término de la ecuación y reescribiendo la ecuación 2.2.1.

$$\begin{aligned} V(r) &= 4e[\sigma^{12}r^{-12} - \sigma^{6}r^{-6}] \\ \tfrac{dV(r)}{dr} &= 4e[12\sigma^{12}r^{-13} - 6\sigma^{6}r^{-7}] = \tfrac{24}{r}e[2(\sigma/r)^{12} - (\sigma/r)^{6}] \end{aligned} \tag{2.2.5}$$

Para resolver el segundo término, se denota que r es una distancia con posiciones (x, y, z):

$$\begin{aligned} \tfrac{dr}{dx} &= \sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2 + (z_2 - z_1)^2}/dx \ \ = \ \ (x_2 - x_1)/r_x \\ \tfrac{dr}{dy} &= (y_2 - y_1)/r_y \quad ; \quad \tfrac{dr}{dz} = (z_2 - z_1)/r_z \end{aligned} \tag{2.2.6}$$

Uniendo las ecuaciones 2.2.5 y 2.2.6 para cada término, la fuerza se expresa como:

$$\begin{aligned} F_x &= \tfrac{24}{r^2} e[2(\sigma/r)^{12} - (\sigma/r)^6] \cdot (x_2 - x_1) \\ F_y &= \tfrac{24}{r^2} e[2(\sigma/r)^{12} - (\sigma/r)^6] \cdot (y_2 - y_1) \\ F_z &= \tfrac{24}{r^2} e[2(\sigma/r)^{12} - (\sigma/r)^6] \cdot (z_2 - z_1) \end{aligned} \tag{2.2.7}$$

El potencial de Lennard - Jones solo puede ser empleado para la interacción de dos partículas, por lo que, los sistemas complejos deberán ser divididos a una expresión de pares para poder implementar este potencial.

2.3. Fuerzas externas entre moléculas de agua

Una vez discutidas las fuerzas de Coulomb y las de LJ entre los átomos, en esta sección describimos las fuerzas entre moléculas, las cuales están dadas entre átomos de diferentes moléculas de agua y nunca entre átomos de la misma molécula.

Supongamos que tenemos dos moléculas. La molécula uno está compuesta por los átomos, $O^{(1)}, H_1^{(1)}, H_2^{(1)}$, mientras que la molécula dos está compuesta por los átomos $O^{(2)}, H_1^{(2)}, H_2^{(2)}$. La interacción entre los oxígenos $O^{(1)} - O^{(2)}$ está dada en nuestra aproximación molecular por la interacción de Coulomb y la de LJ. Por otro lado, las interacciones $O^{(1)} - H_1^{(2)}$, $O^{(1)} - H_2^{(2)}$ están dadas por las interacciones de Coulomb. Finalmente, las interacciones de $H_1^{(1)}$ y $H_2^{(1)}$ con $H_1^{(2)}$ y $H_2^{(2)}$ están dadas por la interacción de Coulomb.

Todas estas interacciones se resumen en la siguiente tabla.

Cuadro 2.1: Interacciones atómicas entre átomos

Átomo	Átomo	Interacción
$O^{(1)}$	$O^{(2)}$	C, LJ
$O^{(1)}$	$H_1^{(2)}$	C
$O^{(1)}$	$H_2^{(2)}$	C
$H_1^{(1)}$	$O^{(2)}$	C
$H_1^{(1)}$	$H_1^{(2)}$	C
$H_1^{(1)}$	$H_2^{(2)}$	C
$H_2^{(1)}$	$O^{(2)}$	C
$H_2^{(1)}$	$H_1^{(2)}$	C
$H_2^{(1)}$	$H_2^{(2)}$	C

Con objeto de ilustrar las interacciones antes descritas, a continuación se describen las ecuaciones para la interacción de Coulomb entre dos moléculas de agua.

$$F_1(r(t_1)) = \frac{1}{4\pi\epsilon}\frac{q_{O^{(1)}}q_{O^{(2)}}}{|r_1|^3}\ \vec{\mathbf{r}}_1(t_1) + \frac{1}{4\pi\epsilon}\frac{q_{O^{(1)}}q_{H_1^{(2)}}}{|r_2|^3}\ \vec{\mathbf{r}}_2(t_1) + \frac{1}{4\pi\epsilon}\frac{q_{O^{(1)}}q_{H_2^{(2)}}}{|r_3|^3}\ \vec{\mathbf{r}}_3(t_1) +$$

$$+ \frac{1}{4\pi\epsilon}\frac{q_{H_1^{(1)}}q_{O^{(2)}}}{|r_4|^3}\ \vec{\mathbf{r}}_4(t_1) + \frac{1}{4\pi\epsilon}\frac{q_{H_1^{(1)}}q_{H_1^{(2)}}}{|r_5|^3}\ \vec{\mathbf{r}}_5(t_1) + \frac{1}{4\pi\epsilon}\frac{q_{H_1^{(1)}}q_{H_2^{(2)}}}{|r_6|^3}\ \vec{\mathbf{r}}_6(t_1) \tag{2.3.1}$$

$$+ \frac{1}{4\pi\epsilon}\frac{q_{H_2^{(1)}}q_{O^{(2)}}}{|r_7|^3}\ \vec{\mathbf{r}}_7(t_1) + \frac{1}{4\pi\epsilon}\frac{q_{H_2^{(1)}}q_{H_1^{(2)}}}{|r_8|^3}\ \vec{\mathbf{r}}_8(t_1) + \frac{1}{4\pi\epsilon}\frac{q_{H_2^{(1)}}q_{H_2^{(2)}}}{|r_9|^3}\ \vec{\mathbf{r}}_9(t_1)$$

Donde las distancias $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3$ ... $\mathbf{r}_9$ corresponden a las distancias entre $O^{(1)} - O^{(2)}$, $O^{(1)} - H_1^{(2)}$, $O^{(1)} - H_2^{(2)}$ ... $H_2^{(1)} - H_2^{(2)}$ respectivamente, y así mismo con las siguientes distancias. De forma similar, se escriben las fuerzas LJ. Estas expresiones se deben generalizar para n moléculas de agua.

Cuando se consideran n moléculas de agua, los cálculos se escalan como $n(n-1)/2$. Al trabajar con miles de moléculas de agua, los cálculos tienden a saturar cualquier equipo de cómputo relativamente rápido, aun cuando se haga uso de la última tecnología tanto de hardware como de software. Esto nos exige utilizar algoritmos de mayor eficacia que nos permitan avanzar con pasos más firmes. Por lo tanto, se decide emplear inteligencia artificial mediante redes neuronales.

2.4. Fuerzas internas en las moléculas de agua

En el capítulo anterior se discutieron las interacciones entre diferentes moléculas. Estas interacciones se describieron mediante fuerzas electrostáticas de Coulomb y de Lennar-Jonnes. No obstante, cada una de estas moléculas está integrada por átomos. Particularmente, una molécula de agua está formada por un oxígeno y dos hidrógenos. La estabilidad de esta molécula la describiremos en esta sección mediante el uso de fuerzas tipo resorte. Precisamente suponemos que el átomo de oxígeno está ejerciendo una fuerza sobre el primer hidrógeno, la cual es normalmente se representa por una fuerza de tipo resorte $F_{OH_1} = -K_r(\mathbf{r_{OH_1}} - \mathbf{r^0_{OH_1}})$. Asimismo, la interacción con el segundo hidrógeno con el oxígeno está dada por $F_{OH_2} = -K_r(\mathbf{r_{OH_2}} - \mathbf{r^0_{OH_2}})$. La constante K es la misma en ambos casos. La interacción entre los enlaces $OH_1 - OH_2$ también está descrita por una fuerza de resorte $F_{OH_1-OH_2} = -K_\theta(\theta_{HOH} - \theta^0_{HOH})$. En estas ecuaciones $\vec{\mathbf{r^0}}$ y θ^0 son la distancia de equilibrio y el ángulo de equilibrio respectivamente, mientras K_r y K_θ describen la rigidez de los resortes. La fuerza interna de cada molécula de agua está dada por:

$$
\begin{aligned}
&r_{ij} = \sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2} \\
&r^0_{ij} = \sqrt{(x^0_i - x^0_j)^2 + (y^0_i - y^0_j)^2 + (z^0_i - z^0_j)^2} \\
&V(r_{HOH}) = \tfrac{k_r}{2}[r_{OH1} - r^0_{OH1}]^2 + \tfrac{k_r}{2}[r_{OH2} - r^0_{OH2}]^2 + \tfrac{k_\theta}{2}(\theta_{HOH} - \theta^0_{HOH})^2 \\
&V(r_{HOH}) = \tfrac{k_r}{2}[\sqrt{(x_O - x_{H1})^2 + (y_O - y_{H1})^2 + (z_O - z_{H1})^2} - r^0_{OH2}]^2 \\
&+\tfrac{k_r}{2}[\sqrt{(x_O - x_{H2})^2 + (y_O - y_{H2})^2 + (z_O - z_{H2})^2} - r^0_{OH2}]^2 \\
&+\tfrac{k_\theta}{2}(\theta_{HOH} - \theta^0_{HOH})^2
\end{aligned}
\tag{2.4.1}
$$

Preparando las derivadas.

$$
U(r_{HOH}) = \tfrac{k_r}{2}(r_{OH1} - r^0_{OH1})^2 \qquad ; \tfrac{\partial U(r_{HOH})}{\partial_{x_O}} = -k_r(r_{OH1} - r^0_{OH1})\tfrac{x_O - x_{H1}}{r_{OH1}} \tag{2.4.2}
$$

$$
V(r_{HOH}) = \tfrac{k_r}{2}(r_{OH2} - r^0_{OH2})^2 \qquad ; \tfrac{\partial V(r_{HOH})}{\partial_{x_O}} = -k_r(r_{OH2} - r^0_{OH2})\tfrac{x_O - x_{H1}}{r_{OH2}} \tag{2.4.3}
$$

$$
\begin{aligned}
W(\theta_{HOH}) &= \tfrac{k_r}{2}(\theta_{HOH} - \theta^0_{HOH})^2 \qquad ; \cos\theta_{HOH} = \tfrac{r_{OH1}\,\cdot\, r_{OH2}}{r_{OH1}\, r_{OH2}} \\
u &= \cos\theta_{HOH} \qquad ; \theta = \arccos(u) \qquad ; \tfrac{\partial\theta}{\partial u} = -\tfrac{1}{\sqrt{1-u^2}} \\
\tfrac{\partial u}{\partial_{x_O}} &= \tfrac{1}{r_{OH1} r_{OH2}} \tfrac{\partial}{\partial x_O}[r_{OH1} \cdot r_{OH2}] + \tfrac{r_{OH1}\cdot r_{OH2}}{r_{OH2}}(-\tfrac{x_O - x_{H1}}{r^3_{OH1}} + \tfrac{r_{OH2}\cdot r_{OH2}}{r_{OH1}}(-\tfrac{x_O - x_{H2}}{r^3_{OH2}}) \\
&= \tfrac{(x_O - x_{H1}) + (x_O - x_{H1})}{r_{OH1} r_{OH2}} - \tfrac{(x_O - x_{H1})}{r^2_{OH1}}\cos\theta_{HOH} - \tfrac{(x_O - x_{H2})}{r^2_{OH2}}\cos\theta_{HOH} \\
\tfrac{\partial W(\theta_{HOH})}{\partial x_O} &= k_\theta \tfrac{\theta_{HOH} - \theta^0_{HOH}}{\sqrt{1-\cos^2\theta_{HOH}}}[\tfrac{(x_O - x_{H1}) + (x_O - x_{H1})}{r_{OH1} r_{OH2}} - \tfrac{(x_O - x_{H1})}{r^2_{OH1}}\cos\theta_{HOH} - \tfrac{(x_O - x_{H2})}{r^2_{OH2}}\cos\theta_{HOH}]
\end{aligned}
\tag{2.4.4}
$$

Entonces, la derivada de $V(r_{HOH})$ queda como la suma de las fuerzas $F_{x_O}(r_{HOH}) + F_{x_{H1}}(r_{HOH}) + F_{x_{H2}}(r_{HOH})$:

$$
\begin{aligned}
F_{x_O}(r_{HOH}) &= -k_r(r_{OH1} - r^0_{OH1})\tfrac{x_O - x_{H1}}{r_{OH1}} - k_r(r_{OH2} - r^0_{OH2})\tfrac{x_O - x_{H1}}{r_{OH2}} \\
&+ k_\theta \tfrac{\theta_{HOH} - \theta^0_{HOH}}{\sqrt{1-\cos^2\theta_{HOH}}}[\tfrac{(x_O - x_{H1}) + (x_O - x_{H1})}{r_{OH1} r_{OH2}} - \tfrac{(x_O - x_{H1})}{r^2_{OH1}}\cos\theta_{HOH} - \tfrac{(x_O - x_{H2})}{r^2_{OH2}}\cos\theta_{HOH}]
\end{aligned}
\tag{2.4.5}
$$

$$F_{x_{H1}}(r_{HOH}) = k_r(r_{OH1} - r^0_{OH1})\frac{x_O - x_{H1}}{r_{OH1}} + k_\theta \frac{\theta_{HOH} - \theta^0_{HOH}}{\sqrt{1-\cos^2\theta_{HOH}}}[-\frac{(x_O - x_{H2})}{r_{OH1}r_{OH2}} + \frac{(x_O - x_{H1})}{r^2_{OH1}}\cos\theta_{HOH}] \tag{2.4.6}$$

$$F_{x_{H2}}(r_{HOH}) = k_r(r_{OH2} - r^0_{OH2})\frac{x_O - x_{H2}}{r_{OH2}} + k_\theta \frac{\theta_{HOH} - \theta^0_{HOH}}{\sqrt{1-\cos^2\theta_{HOH}}}[-\frac{(x_O - x_{H1})}{r_{OH1}r_{OH2}} + \frac{(x_O - x_{H2})}{r^2_{OH2}}\cos\theta_{HOH}] \tag{2.4.7}$$

En el capítulo anterior, al igual que en este, es necesario especificar las constantes empleadas en todas las fórmulas de interacción para la obtención de las fuerzas. La siguiente tabla define estos parámetros.

Cuadro 2.2: Parámetros de los modelos de interacción

Parámetros armónicos	
$r_0 = 0{,}957$ Å	; $k_r = 1{,}914 E_h/$ Å^2
$\theta_0 = 104{,}52°$	; $K_\theta = 0{,}239 E_h/rad^2$
Cargas eléctricas	
$q_{A_u} = 0{,}000e$	
$q_O = -0{,}834e$	
$q_H = +0{,}417e$	
LJ parámetros	
$\xi_{A_uA_u} = 8{,}4301 \times 10^{-3} E_h$;	$\sigma_{A_uA_u} = 2{,}629$ Å
$\xi_{A_uO} = 1{,}4293 \times 10^{-3} E_h$;	$\sigma_{A_uO} = 2{,}8781$ Å
$\xi_{OO} = 2{,}4234 \times 10^{-4} E_h$;	$\sigma_{OO} = 3{,}1507$ Å

Capítulo 3

Redes Neuronales Artificiales

Los primeros científicos en presentar un sistema artificial con la capacidad de imitar el aprendizaje humano fueron el psiquiatra Warren McCulloch y el matemático Walter Pitts en 1943. El modelo que presentan, aunque rústico, da origen a las primeras *redes neuronales artificiales (RNA)* (Isasi Viñuela, 2004 [2]).

Para la creación de una neurona artificial, analicemos primero su contraparte biológica. Una neurona es la unidad celular fundamental del sistema nervioso humano, la cual, se compone de un cuerpo, una sinapsis, una dendrita y un axón. Mediante este conjunto de elementos, la neurona recibe y crea señales que dan origen a un estímulo físico-químico. Por medio del sistema anterior, una neurona tiene la facultad de trabajar con otras para generar una estructura única, la que, es capaz de almacenar nuestros recuerdos, pensamientos o aprendizajes como impulsos eléctricos.

3.1. Principios de una red neuronal artificial

Una neurona artificial entonces copia la estructura neuronal humana mediante un modelo matemático, con el fin de imitar su funcionamiento. El cuerpo de la neurona es representado por una suma, $\sum$, la sinapsis mediante pesos, w, las dendritas son los estímulos de entrada, x, la respuesta a los estímulos de entrada z y, finalmente, un componente sin equivalente biológico, el cual refuerza el estímulo de entrada, b.

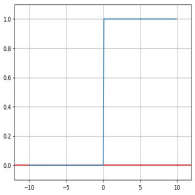
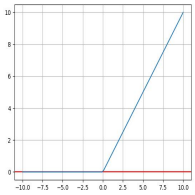
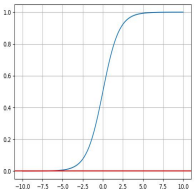
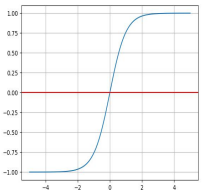
$$z = \sum_{i=0}^{n} w_i x_i + b \tag{3.1.1}$$

El modelo anterior si es entrenado con un número determinado de iteraciones obtendrá la capacidad de guardar información por medio de la actualización de sus pesos sinápticos w, sin embargo, aún es incapaz de diferenciar entre las características únicas de algún conjunto de datos y por ende, no puede generar una clasificación de los mismos. Para este fin se emplean las *funciones de activación*, las cuales, tienen la facultad de limitar el valor del dominio de la función respecto a un umbral dado. Así, las salidas generadas serán parte de una serie de conjuntos con una división evidente entre ellos. Una característica muy valorada de estas funciones es la no linealidad, la cual, responde a la realidad de los

impulsos de entrada que tienen una configuración de patrones no rectilíneos, de ahí que sean ampliamente utilizadas (I. Foodfellow, 2016 [8]).

Generalmente se emplean las siguiente funciones de activación:

Cuadro 3.1: Funciones de activación

Nombre	Ecuación	Gráfica
Binaria	$\phi(z) = \begin{cases} 0, z < 0 \\ 1, z \geq 0 \end{cases}$	
ReLu	$\phi(z) = max\{0, z\} = \begin{cases} 0, z \leq 0 \\ z, z > 0 \end{cases}$	
Sigmoide	$\phi(z) = \frac{1}{1+e^{-z}}$	
Tangente hiperbólica	$\phi(z) = tanh(z) = \frac{e^{z}-e^{-z}}{e^{z}+e^{-z}}$	

Si aplicamos cualquier función de activación al modelo 3.1.1 tendremos una función f en términos de z, esta $f(z)$ da origen al llamado *perceptrón* como el que se muestra en la ilustración 3.1.1

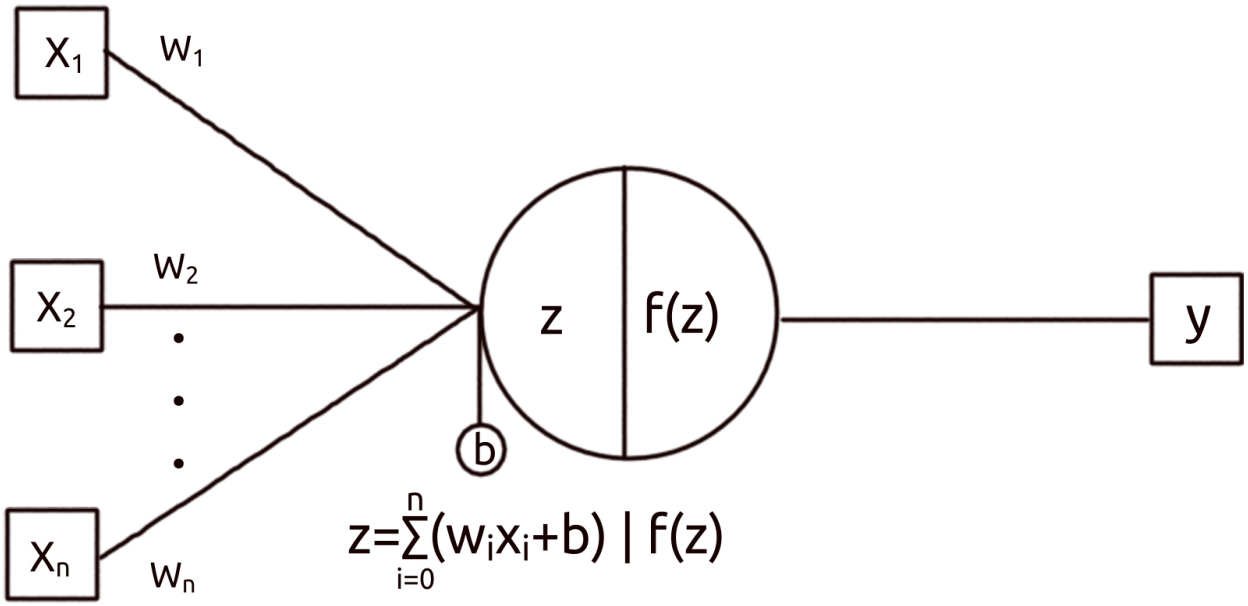


Figura 3.1.1: Representación gráfica de un perceptrón

Como ejemplo, usemos la función sigmoidea para generar un perceptrón en forma:

$$f(z) = (1 + e^{-z})^{-1} \rightarrow f(z) = [1 + \exp(-(\sum_{i=0}^{n} w_i x_i + b))]^{-1} \tag{3.1.2}$$

Para llegar a un resultado idóneo en el entrenamiento del perceptrón es necesario dar valores iniciales aleatorios a nuestros pesos w en la primera iteración de nuestro modelo. El ajuste para llegar a la respuesta esperada z se generará con la iteración de la función $F(z)$.

A manera de ejemplo, probemos este modelo de perceptrón para predecir la compuerta lógica OR, mediante una función de activación tipo escalón 3.1, y con unos pesos iniciales en cero:

Cuadro 3.2: Valores iniciales

x_1, x_2	w_1, w_2	refuerzo b	Resultado esperado
$0, 0$	$0, 0$	$-\frac{1}{2}$	0
$0, 1$	$0, 0$	$-\frac{1}{2}$	1
$1, 0$	$0, 0$	$-\frac{1}{2}$	1
$1, 1$	$0, 0$	$-\frac{1}{2}$	1

Sustituyendo estos valores en la ecuación 3.1.1 y aplicando la función de activación.

$$\begin{aligned} &z = w_1 \cdot x_1 + w_2 \cdot x_2 + b \qquad \rightarrow \qquad f(z) \\ &(0)(0) + (0)(0) + (-\tfrac{1}{2}) = -\tfrac{1}{2} \rightarrow -\tfrac{1}{2} \leq 0 \qquad \therefore \qquad y \text{ no se activa} \\ &\text{y es la respuesta esperada} \end{aligned} \tag{3.1.3}$$

Ahora, encontremos la respuesta de la entrada $0, 1$

$$(0)(0) + (0)(1) + (-\tfrac{1}{2}) = -\tfrac{1}{2} \rightarrow -\tfrac{1}{2} \geq 1 \qquad \therefore \qquad y \text{ no se activa}$$

Por lo que, debemos de actualizar algún peso para que se consiga el valor superior o igual a 1

$$(0)(0) + (1)(1) + (-\tfrac{1}{2}) = \tfrac{1}{2} \rightarrow \tfrac{1}{2} \geq 1 \qquad \therefore \qquad y \text{ no se activa}$$

Nuevamente actualicemos los pesos

$$(0)(0) + (2)(1) + (-\tfrac{1}{2}) = 1{,}5 \rightarrow 1{,}5 \geq 1 \qquad \therefore \qquad y \text{ se activa} \tag{3.1.4}$$

Hagamos lo mismo para las demás variables $1, 0$ y $1, 1$ obviando el proceso de iteración.

$$(2)(1) + (2)(0) + (-\tfrac{1}{2}) = 1{,}5 \rightarrow 1{,}5 \geq 1 \qquad \therefore \qquad y \text{ se activa} \tag{3.1.5}$$

$$(2)(1) + (2)(1) + (-\tfrac{1}{2}) = 3{,}5 \rightarrow 3{,}5 \geq 1 \qquad \therefore \qquad y \text{ se activa} \tag{3.1.6}$$

Finalmente, usando estos pesos en la ecuación 3.1.3 y la ecuación 3.1.4

$$\begin{aligned} &(2)(0) + (2)(0) + (-\tfrac{1}{2}) = -\tfrac{1}{2} \rightarrow -\tfrac{1}{2} \leq 0 \qquad \therefore \qquad y \text{ no se activa} \\ &(2)(0) + (2)(1) + (-\tfrac{1}{2}) = 1{,}5 \rightarrow 1{,}5 \geq 1 \qquad \therefore \qquad y \text{ se activa} \end{aligned} \tag{3.1.7}$$

Así, los valores quedan como:

Cuadro 3.3: Valores finales

x_1, x_2	w_1, w_2	refuerzo b	f(z)=y
$0, 0$	$2, 2$	$-\frac{1}{2}$	0
$0, 1$	$2, 2$	$-\frac{1}{2}$	1
$1, 0$	$2, 2$	$-\frac{1}{2}$	1
$1, 1$	$2, 2$	$-\frac{1}{2}$	1

Estos pesos funcionan, por lo tanto, se conservan. Notar que f(z)=y, representa la separación de nuestros datos. Por ende, la clasificación de nuestra compuerta lógica OR.

3.2. Redes neuronales monocapa

Una *capa de procesamiento* se crea a partir del encadenamiento de múltiples perceptrón es mediante un único conjunto de entradas, donde cada perceptrón aprenderá una característica única respecto a nuestros datos, así generará una serie de respuestas de salida que dividirá nuestros datos. Generalmente, se emplea una misma función de activación para toda la capa, mediante la cual busca generar practicidad a la hora de implementar el modelo. De esta forma, la única variación se encuentra en los pesos iniciales.

En ocasiones nos encontramos con un problema que puede tener múltiples soluciones, o bien múltiples clasificaciones. En estos casos, un único perceptrón resulta incapaz de resolver el problema de clasificación. Para dar solución a este contratiempo se crearon las *redes neuronales mono capa* que, como su nombre indica son redes que constan de una única capa de procesamiento (Jeffrey A, 1997 [10]). Teniendo el siguiente modelo matemático:

$$\begin{aligned} y_1 &= f(\textstyle\sum_{i=0}^{n} w_i^{(1)} x_i + b_1) \\ y_2 &= f(\textstyle\sum_{i=0}^{n} w_i^{(2)} x_i + b_2) \\ y_3 &= f(\textstyle\sum_{i=0}^{n} w_i^{(3)} x_i + b_3) \end{aligned} \tag{3.2.1}$$

Para entender mejor entendimiento de las capas ocultas resulta más sencillo analizarlo por medio de su representación matricial y su representación gráfica:

$$\underset{\text{Pesos w}}{\begin{bmatrix} 0{,}47 & 0{,}03 & ... & 1{,}02 \\ 0{,}43 & 1{,}06 & ... & 2{,}78 \\ 2{,}43 & 2{,}90 & ... & 1{,}93 \\ ... & ... & ... & ... \\ 3{,}37 & 0{,}33 & ... & 0{,}33 \end{bmatrix}} \cdot \underset{\text{Entradas x}}{\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ .. \\ x_n \end{bmatrix}} + \underset{\text{Refuerzo } b}{\begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ .. \\ b_n \end{bmatrix}} \rightarrow \underset{\text{Salidas z}}{\begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \\ .. \\ z_n \end{bmatrix}} \rightarrow \underset{\text{F. activación}}{\begin{bmatrix} y_1 = f(z_1) \\ y_2 = f(z_2) \\ y_3 = f(z_3) \\ .. \\ y_n = f(z_n) \end{bmatrix}}$$

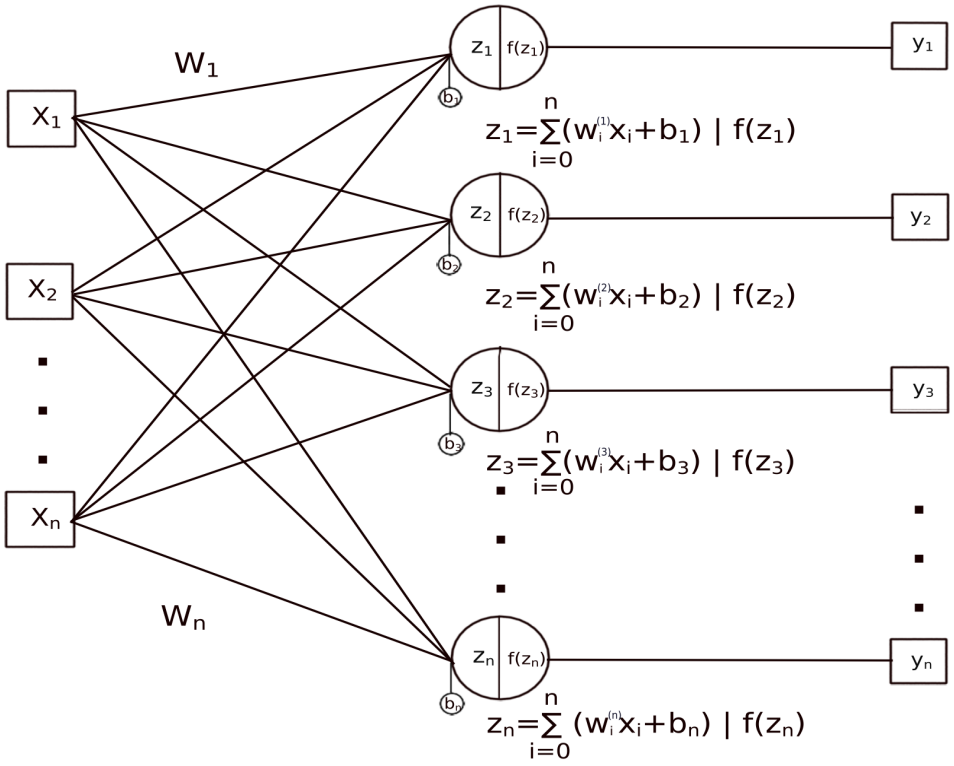


Figura 3.2.1: Representación gráfica de un perceptrón monocapa

Notar que no es necesario que el número de neuronas sea mayor al número de entradas. Lo que se busca en realidad es usar el menor número de neuronas, para tener un mejor rendimiento a la hora de entrenar el modelo.

3.3. Redes neuronales multicapa

Dentro de un modelo monocapa tenemos la capacidad de guardar todas las características únicas de nuestros estímulos de entrada, no obstante, si nuestros datos comparten características tales como, pelaje, orejas, tamaño, color, etc. no podremos asegurar que mediante estos adjetivos encontremos una clasificación determinante. Como muestra de ello y a manera de ejemplo que haríamos ente un perro que parece gato o bien un gato que parece perro. La identificación de las particularidades en los modelos vistos hasta ahora resulta lo suficientemente complicado como para no implementarlos. Para conseguir una correcta clasificación con estas dificultades es necesario implementar un modelo *multicapa*.

La configuración de las *redes neuronales multicapa* parten de la base del modelo monocapa. Se crea una nueva cadena de neuronas de cualquier tamaño. Estas neuronas tomarán las salidas $f(z_m)$ de la base para convertirse en nuevos impulsos de entrada x_m. Así, cada nueva cadena generará lo que se le conoce como *capas ocultas* o capas de procesamiento. Las capas que vayamos a agregar a la estructura base no necesariamente compartirán tamaño, función de activación ni refuerzo b, sino más bien, lo que se busca es crear una capa distinta a la anterior, para generar una separación característica. Los datos que comparten peculiaridades estarán guardados intrínsecamente dentro de estas capas ocultas. De esta forma, alguna neurona de nuestras capas ocultas tendrá la capacidad de discernir entre sí, es perro, o bien un gato, ya que deberá pasar por una serie de funciones de activación antes de poder tomar una elección.

Es hasta este momento resulta evidente que la última capa de procesamiento $f(z_m^{(n)})$ no puede cambiar de tamaño respecto a la clasificación y_n que deseemos hacer. El número de neuronas de salida está casado con nuestro sistema clasificatorio. En el caso de las redes monocapa, no es evidente debido a que el número de neuronas de entrada es el mismo que las de salida.

Las ecuaciones para este tipo de redes están dadas de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} y_1 &= f(\textstyle\sum_{i=0}^{n} w_i^{(1,n)} \cdot .... \cdot f(\sum_{i=0}^{n} w_i^{(1,2)} \cdot f(\sum_{i=0}^{n} w_i^{(1,1)} \cdot x_i + b_1^{(1)})_1^{(1)} + b_2^{(1)})_1^{(2)} + ... + b_n^{(1)})_1^{(n)} \\ y_2 &= f(\textstyle\sum_{i=0}^{n} w_i^{(2,n)} \cdot .... \cdot f(\sum_{i=0}^{n} w_i^{(2,2)} \cdot f(\sum_{i=0}^{n} w_i^{(2,1)} \cdot x_i + b_1^{(2)})_2^{(1)} + b_2^{(2)})_2^{(2)} + ... + b_n^{(2)})_2^{(n)} \end{aligned} \tag{3.3.1}$$

La diferencia entre las ecuaciones previas será establecida por el refuerzo b que elijamos, al igual que por los pesos w que normalmente son aleatorios al inicio de nuestro entrenamiento.

Nuevamente, observemos su representación matricial para obtener un mejor entendimiento de este modelo.

$$\begin{matrix} \text{w capa n} \\ \begin{bmatrix} 0{,}37 & 0{,}73 & ... & 0{,}02 \\ 1{,}03 & 1{,}56 & ... & 0{,}78 \\ 1{,}43 & 2{,}93 & ... & 0{,}93 \\ ... & ... & ... & ... \\ 1{,}37 & 2{,}33 & ... & 0{,}22 \end{bmatrix} \end{matrix} \cdot \begin{matrix} \text{Entradas x} \\ \begin{bmatrix} f(z_1^{(n)}) \\ f(z_2^{(n)}) \\ f(z_3^{(n)}) \\ .. \\ f(z_m^{(n)}) \end{bmatrix} \end{matrix} + \begin{matrix} \text{Refuerzo } b \\ \begin{bmatrix} b_1^{(n)} \\ b_2^{(n)} \\ b_3^{(n)} \\ .. \\ b_m^{(n)} \end{bmatrix} \end{matrix} \rightarrow \begin{matrix} \text{Salidas z} \\ \begin{bmatrix} z_1^{(n+1)} \\ z_2^{(n+1)} \\ z_3^{(n+1)} \\ .. \\ z_m^{(n+1)} \end{bmatrix} \end{matrix} \rightarrow \begin{matrix} \text{F. activación} \\ \begin{bmatrix} y_1^{(n)} = f(z_1^{(n+1)}) \\ y_2^{(n)} = f(z_2^{(n+1)}) \\ y_3^{(n)} = f(z_3^{(n+1)}) \\ .. \\ y_m^{(n)} = f(z_m^{(n+1)}) \end{bmatrix} \end{matrix}$$

Un perceptrón multicapa es una función de la forma $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$. También representado como n-L-m donde n representan las entradas, L las capas ocultas y m las salidas. De manera particular, puede existir una RNA multicapa con una sola neurona por capa de procesamiento, si ese el caso se tendría la siguiente ecuación:

$$f(z_t) = f(f_L(f_{L-1}(....f_1(z)))) \tag{3.3.2}$$

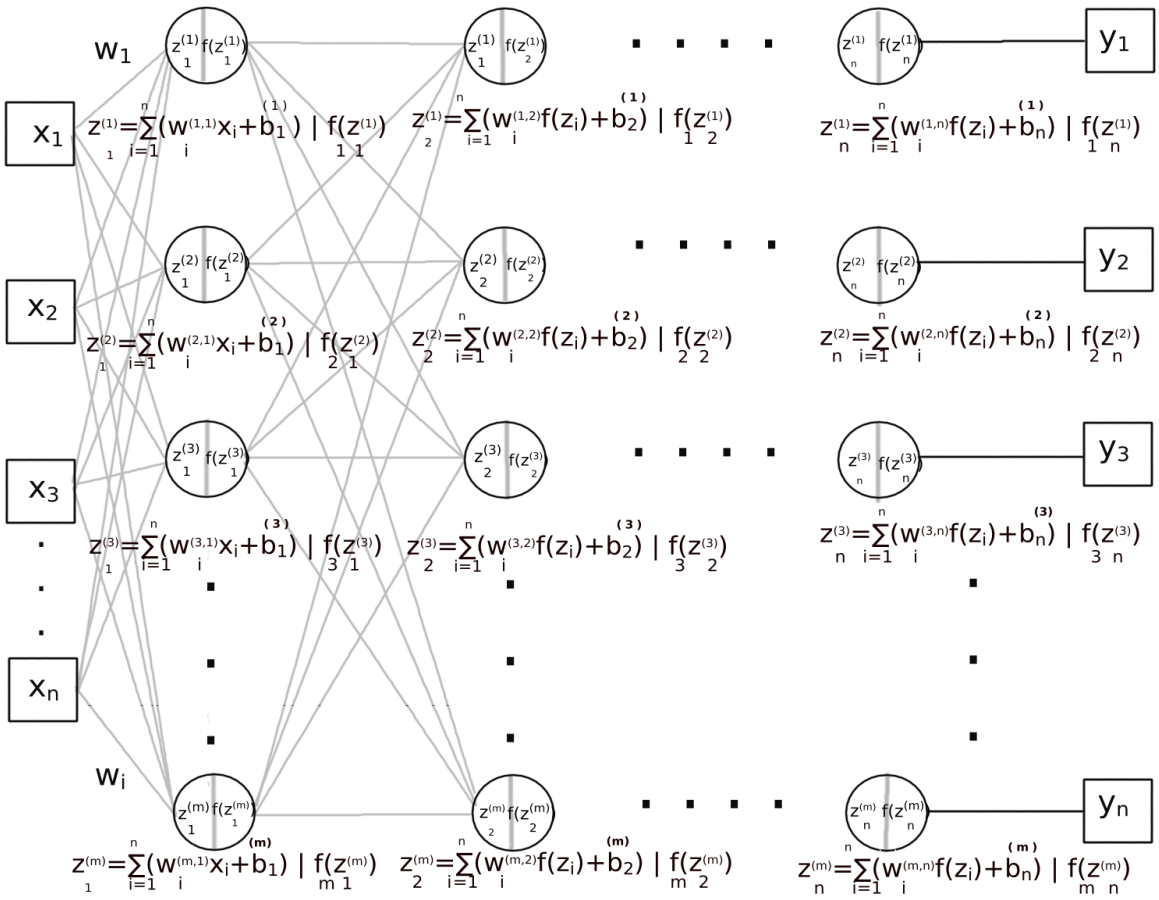


Figura 3.3.1: Representación gráfica de un perceptrón multicapa

3.4. Algoritmo de retro-propagación

Si un perceptrón tiene un error, ya sea que utilizó un peso demasiado grande o, por el contrario, demasiado pequeño, este se propagará por la red hasta llegar al resultado final. Para poder corregir este error con cualquiera de las estructuras vistas en las secciones anteriores, se deben emplear múltiples iteraciones, esperando que en alguna de ellas se encuentre este error y se corrija. Una forma más eficiente para dar solución a este problema es emplear la *retro propagación* la cual, emplea la estructura de las RNA multicapa para realizar el cálculo del error cuadrático medio del resultado y_n final, después propagar este cálculo a las neuronas anteriores, de esta forma la neurona con menor contribución a la respuesta total será encontrada y actualizada sin necesidad de generar una nueva iteración. Para poder recorrer una RNA multicapa de forma inversa es necesario realizar la derivada de todos los componentes de cada una de las neuronas (Garcia Cabello, 2002 [3]).

En términos de funciones, lo que estamos efectuando es la aplicación del gradiente descendente para encontrar el mínimo global, por lo que, se deben cumplir los siguientes teoremas:

Teorema 1: Sea $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ una función diferenciable en el vecindario de algún punto $w = (w_1, ..., w_i)$. Entonces, el gradiente de f en $w = (w_1, ..., w_i)$ denotado $\bigtriangledown f(w_1, ..., w_i)$.

1. representa la pendiente de la recta tangente a la función f en el punto w.

2. Apunta en la dirección en la que la función f crece más rápidamente. Por lo tanto, $-\bigtriangledown F$ indica la dirección de disminución más rápida.

3. Es ortogonal a las superficies de nivel (generalización del concepto de curva de nivel para una función de dos variables) de f, es decir, las de la forma $f(w_1, ..., w_i) = k$ para una constante k

Teorema 2: Sea $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ una función diferenciable. Existe un mínimo local que se puede alcanzar mediante la actualización iterativa de acuerdo con el sistema.

La idea de este método consta en encontrar los valores mínimos de una función dada $F(w_n)$ para ello, derivamos cada una de las funciones que se encuentran como salida a nuestra red neuronal.

$$\bigtriangledown f(w_1, ..., w_i) = (\partial f(w)/\partial w_1, ..., \partial f(w)/\partial w_i) \tag{3.4.1}$$

Realizando este proceso mediante la regla de los cuatro pasos.

$$\begin{gathered} \lim_{h\to 0}[f(w+h) - f(w)]/h \\ \approx (\lim_{h\to 0}[f(w_1+h) - f(w_1)]/h, ..., \lim_{h\to 0}[f(w_i+h) - f(w_i)]/h) \end{gathered} \tag{3.4.2}$$

Despegando la diferencia del caso general i obtenemos.

$$\begin{aligned} \bigtriangledown f(w_i) &= \lim_{h\to 0}[f(w_i+h) - f(w_i)]/h \\ f(w_i+h) &\approx f(w_i) + h \bigtriangledown f(w_i) \end{aligned} \tag{3.4.3}$$

Si consideramos h como un decremento en dirección opuesta a la red neuronal $h = -\epsilon \bigtriangledown f(w_n)$, donde épsilon no es negativo y es una variable similar a la tasa de aprendizaje. Aplicando esto a la ecuación 3.4.3 entonces tenemos:

$$f(w_i - \epsilon \bigtriangledown f(w_i)) \approx f(w_i) - \epsilon \bigtriangledown f(w_i) \bigtriangledown f(w_i) \approx f(w_i) - \epsilon(\bigtriangledown f(w_i))^2 \leq f(w_i) \tag{3.4.4}$$

Por lo tanto, la función que actualiza el valor mínimo donde ya aplicamos la derivada es la siguiente:

$$w_i^{(n+1,m)} = w_i^{(n,m)} - \epsilon \bigtriangledown f(w_i^{(n,m)}) \tag{3.4.5}$$

Si aplicamos este procedimiento al refuerzo b en vez de los pesos w obtendríamos.

$$b_i^{(n+1,m)} = b_i^{(n,m)} - \epsilon \bigtriangledown f(b_i^{(n,m)}) \tag{3.4.6}$$

Resolviendo la ecuación 3.4.5 respecto a w empleando la regla de la cadena y siguiendo el procedimiento del artículo de Kiprono Elijah [4].

$$\frac{\partial y}{\partial x} = \frac{\partial y}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial x} \tag{3.4.7}$$

Tenemos:

$$\frac{\partial f}{\partial w_i^{(n,m)}} = \frac{\partial f}{\partial f(z_m^{(n)})} \cdot \frac{\partial f(z_m^{(n)})}{\partial z_m^{(n)}} \cdot \frac{\partial z_m^{(n)}}{\partial w_i^{(n,m)}} \tag{3.4.8}$$

Obtengamos primero la derivada de z respecto a w

$$\begin{aligned} \frac{\partial z}{\partial w_i^{(n,m)}} &= \frac{\partial}{\partial w_i^{(n,m)}}(f^{(1)} \cdot w_1^{(1,1)} + f^{(2)} \cdot w_2^{(1,2)} + ... + f^{(n)} \cdot w_i^{(n,m)}) \\ \frac{\partial z}{\partial w_i^{(n,m)}} &= f^{(n)} \cdot 1 \end{aligned} \tag{3.4.9}$$

Siendo que $f^{(n)}$ es la función de activación anterior a la capa de salida, y $w^{(n,m)}$ los pesos de la capa que deseamos actualizar.

Ahora derivemos la función de activación respecto de z, utilizando como ejemplo a la sigmoidea tenemos:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(z_m^{(n)})}{\partial z_m^{(n)}} &= \frac{\partial}{\partial z_m^{(n)}}(f(z_m^{(n)})) = \frac{\partial}{\partial z_m^{(n)}}[1/(1+\epsilon^{-z_m^{(n)}})] \\ \frac{\partial f(z_m^{(n)})}{\partial z_m^{(n)}} &= f(z_m^{(n)})(1 - f(z_m^{(n)})) \end{aligned} \tag{3.4.10}$$

Ahora, para la derivada de la función de perdida tenemos:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial f(z_m^{(n)})} &= \frac{\partial}{\partial f(z_m^{(n)})}(-[t \cdot ln \cdot f(z_m^{(n)}) + (1-t)ln(1 - f(z_m^{(n)}))]) \\ \frac{\partial f}{\partial f(z_m^{(n)})} &= \frac{-t}{f(z_m^{(n)})} + \frac{1-t}{1-f(z_m^{(n)})} \end{aligned} \tag{3.4.11}$$

Sustituyendo todas las derivadas en la principal 3.4.8 tenemos:

$$\begin{aligned} &\frac{\partial f}{\partial w_i^{(n,m)}} = \frac{-t}{f(z_m^{(n)})} + \frac{1-t}{1-f(z_m^{(n)})} \cdot f(z_m^{(n)})(1 - f(z_m^{(n)})) \cdot f^{(n)} \\ &= \frac{-t}{f(z_m^{(n)})} \cdot f(z_m^{(n)})(1 - f(z_m^{(n)}) + \frac{1-t}{1-f(z_m^{(n)})} \cdot f(z_m^{(n)})(1 - f(z_m^{(n)}) \cdot f^{(n)} \\ &= -t + f(z_m^{(n)})t + f(z_m^{(n)}) - f(z_m^{(n)})t \cdot f^{(n)} \\ &= (f(z_m^{(n)}) - t) \cdot f^{(n)} \end{aligned} \tag{3.4.12}$$

Si aplicamos este mismo proceso para el refuerzo b con el que obtenemos el sesgo, entonces obtenemos:

$$\frac{\partial f}{\partial b_n} = (f(z_m^{(n)}) - t) \cdot 1 \tag{3.4.13}$$

Finalmente, resolviendo las ecuaciones 3.4.5 y 3.4.6 donde ya estaremos actualizando los pesos y el refuerzo b entonces tendríamos:

$$\begin{aligned} w_i^{(n,m)} &= w_i^{(n,m)} - \epsilon \frac{\partial f}{\partial w_i^{(n,m)}} \\ &= w_i^{(n,m)} - \epsilon \cdot (f(z_m^{(n)}) - t) \cdot f^{(n)} \\ b_n &= b_n - \epsilon \frac{\partial f}{\partial b_n} \\ &= b_n - \epsilon \cdot (f(z_m^{(n)}) - t) \cdot 1 \end{aligned} \tag{3.4.14}$$

Donde t normalmente tiene el valor de 1 tanto para los pesos w como para los refuerzos b. Este valor afirma si es o no es una contribución adecuada.

Para encontrar la contribución menos favorable, se deberá realizar una nueva derivada. Esto nos llevará a recorrer al modelo de forma inversa. Este recorrido inverso se realiza de la siguiente manera:

$$\frac{\partial f}{\partial w_i^{(n,m-1)}} = \frac{\partial f}{\partial f(z_m^{(n)})} \cdot \frac{\partial f(z_m^{(n)})}{\partial z_m^{(n)}} \cdot \frac{\partial z_m^{(n)}}{\partial f(z_m^{(n-1)})} \cdot \frac{\partial f(z^{(n-1)})}{\partial z_m^{(n-1)}} \cdot \frac{\partial z_m^{(n-1)}}{\partial w_i^{(n,m-1)}} \tag{3.4.15}$$

El número de derivadas efectuadas dependerá del número de neuronas y capas ocultas que se estén empleando en nuestro modelo. Una vez que se encontró la neurona dentro de estas capas con la contribución menos favorable, se procederá a actualizar su peso y su refuerzo b. Al efectuarse una nueva época en el modelo, el procedimiento de retropropagación deberá de realizarse nuevamente.

Consideremos, a modo de ejemplo, un valor objetivo de 0,1. Supongamos que tenemos una salida de $y_n = 0{,}751$, obteniendo entonces un error de $\frac{1}{2} \cdot (0{,}1 - 0{,}75)^2 = 0{,}211$. Dado que en este ejemplo solo existe una neurona de salida, este error representa también el error total. Empleando estas condiciones, procedamos a utilizar la ecuación 3.4.8.

Calculemos el primer término que, en este caso, es la derivada del error total respecto a y_0.

$$\frac{\partial f}{\partial f(z_m^{(n)})} = \frac{\partial E_{total}}{y_0} = 2 * \frac{1}{2}(0{,}1 - 0{,}75)^{2-1} \cdot -1 = -(0{,}1 - 0{,}75) = 0{,}65 \tag{3.4.16}$$

Ahora pasemos al segundo término donde, si empleamos la ecuación 3.4.10 obtenemos lo siguiente:

$$\frac{\partial f(z_m^{(n)})}{\partial z_m^{(n)}} = f(z_m^{(n)})(1 - f(z_m^{(n)})) = y_0 \cdot (1 - y_0) = 0{,}75 \cdot (1 - 0{,}75) = 0{,}1875 \tag{3.4.17}$$

Por último, calculemos el tercer término, donde usemos la ecuación 3.4.9:

$$\frac{\partial z}{\partial w_i^{(n,m)}} = f^{(n)} \cdot 1 = 0{,}45 \cdot 1 \tag{3.4.18}$$

Donde 0,45 es la salida de la neurona anterior a la que deseamos llegar.

Sustituyendo él estos resultados en la ecuación 3.4.8 tenemos:

$$\frac{\partial f}{\partial w_i^{(n,m)}} = 0{,}65 \cdot 0{,}1875 \cdot 0{,}45 = 0{,}05484375 \tag{3.4.19}$$

Continuando con el proceso para corregir este error, toca usar la ecuación 3.4.14 para los pesos w:

$$w_i^{(n,m)} = w_i^{(n,m)} - \epsilon \frac{\partial f}{\partial w_i^{(n,m)}} = (0{,}5) - (0{,}4) \cdot 0{,}05484375 = 0{,}4780625 \tag{3.4.20}$$

Donde 0,5 representa el peso aleatorio que se le asigno a la neurona que deseamos actualizar, mientras que 0,4 es la tasa de aprendizaje. Aplicando este procedimiento a todas las neuronas anteriores, podremos mejorar el resultado obtenido. Si deseamos realizar el procedimiento para el cálculo del bias, obtendremos un valor menor que el peso w. De esta forma estaremos más cerca del resultado esperado, en comparación con el resultado obtenido previamente, esto sin realizar una nueva época.

Capítulo 4

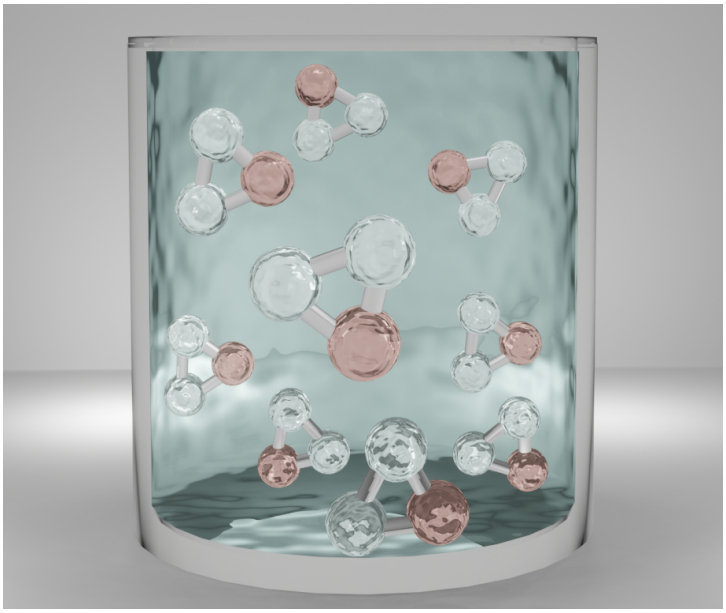
Decodificando las interacciones atómicas

A partir de la experimentación se obtuvieron las distancias y los ángulos necesarios para generar numéricamente una molécula de agua (ver tabla 2.2). Si replicamos esta molécula de agua repetidamente y de forma aleatoria dentro de un contenedor cilíndrico, asegurando una separación adecuada entre cada una de ellas, podremos simular un estado gaseoso. Reduciendo poco a poco el radio del cilindro hasta alcanzar una densidad de $1g/cm$, considerando la temperatura y la presión dentro del contenedor, pasaremos de un estado gaseoso a un estado líquido. Aunque, podamos decir que obtuvimos agua, esta aún no es estable, debido a que, su configuración en el espacio no es del todo correcta. La estabilización de estas aguas en su estado líquido se consigue dejando pasar el tiempo dentro del contenedor (haciendo una y otra vez los cálculos de interacciones). De esta forma, se obtuvo un contenedor con 10496 moléculas de agua (ver imagen 4.0.1) O, H_1, H_2, estas se encuentran sometidas a una temperatura y presión constantes con el fin de mantener su estado líquido. Donde cada elemento O, H_1, H_2 en el contenedor posee coordenadas x, y, z como se muestra a continuación:

$$\begin{gathered} O_x^0, O_y^0, O_z^0, H_{1x}^0, H_{1y}^0, H_{1z}^0, H_{2x}^0, H_{2y}^0, H_{2z}^0 \\ O_x^1, O_y^1, O_z^1, H_{1x}^1, H_{1y}^1, H_{1z}^1, H_{2x}^1, H_{2y}^1, H_{2z}^1 \\ \vdots \\ O_x^{10496}, O_y^{10496}, O_z^{10496}, H_{1x}^{10496}, H_{1y}^{10496}, H_{1z}^{10496}, H_{2x}^{10496}, H_{2y}^{10496}, H_{2z}^{10496} \end{gathered} \tag{4.0.1}$$

Donde el superíndice indica el identificador de cada molécula de agua y el subíndice denota la coordenada de cada elemento. Debido a que se utilizan dos hidrógenos, para evitar confusión se agrega 1 y 2 cada hidrógeno respectivamente.

Figura 4.0.1: Contenedor de agua



Como se vio en el capítulo dos, para obtener las fuerzas de Coulomb y las fuerzas LJ se deberán considerar cada uno de los átomos, debido a que cada uno de estos percibe su entorno de una forma diferente. En nuestro caso, los $10496 * 3 = 31488$ átomos de agua. La fuerza 1 $F_{O_x^1}$ se calculará mediante los 31487 átomos restantes. La fuerza 2 $F_{O_y^1}$ será obtenida por los 31486 átomos restantes. Este comportamiento se describe con la siguiente ecuación:

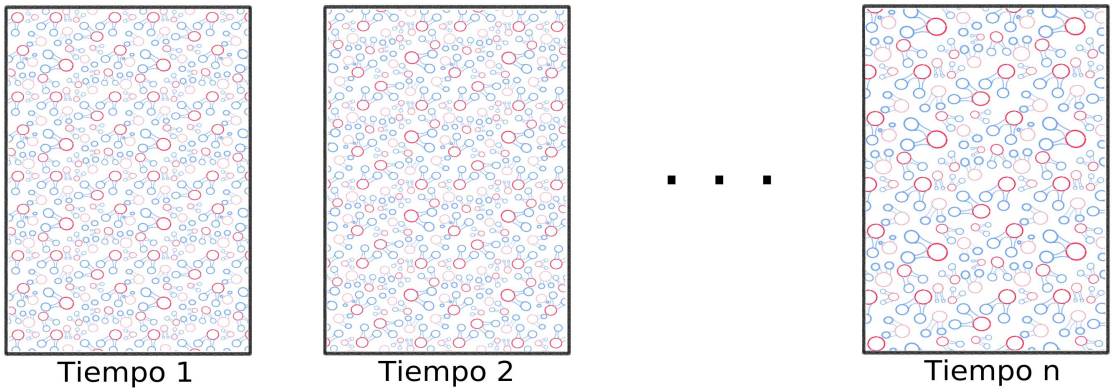
$$N_{interacciones} = \frac{n(n-1)}{2} \tag{4.0.2}$$

Donde n es el número de átomos dentro del contenedor.

Debido a la fuerza interna entre los átomos, siempre existirá movimiento dentro nuestro contenedor, por lo que, el análisis que generemos en un tiempo t_0 siempre será diferente a un tiempo $t_1, t_2, ..., t_n$ (ver imagen 4.0.2).

Para los 31488 átomos de agua tendríamos 495731328 interacciones por calcular. Si agregamos las n capturas de tiempo a nuestro análisis, estaremos ante un sistema cuyo comportamiento está descrito por $N_{interacciones} \cdot N_{capturas}$.

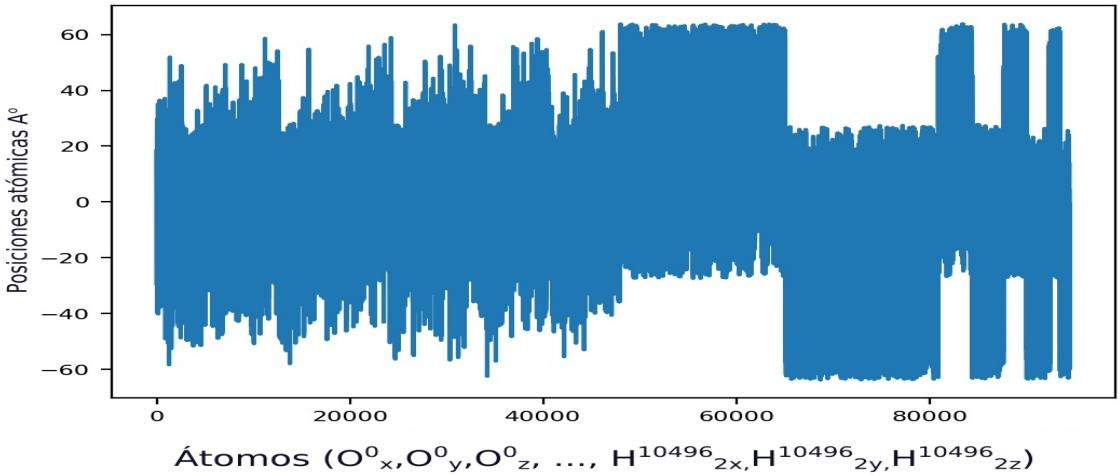
Figura 4.0.2: Diferentes cuadros de tiempo $t_1, t_2, ..., t_n$



El número de cálculos a realizar tiene un comportamiento similar al de una función de n^2 por lo que, al aumentar considerablemente el número de átomos o prolongar las capturas de tiempo de los análisis, será imposible realizar todos los cálculos requeridos con nuestro equipo computacional actual (ver apéndice 8.3). Una mejor alternativa es implementar una RNA, la cual mejora tanto en tiempo como en potencia al no calcular, sino predecir, estas fuerzas.

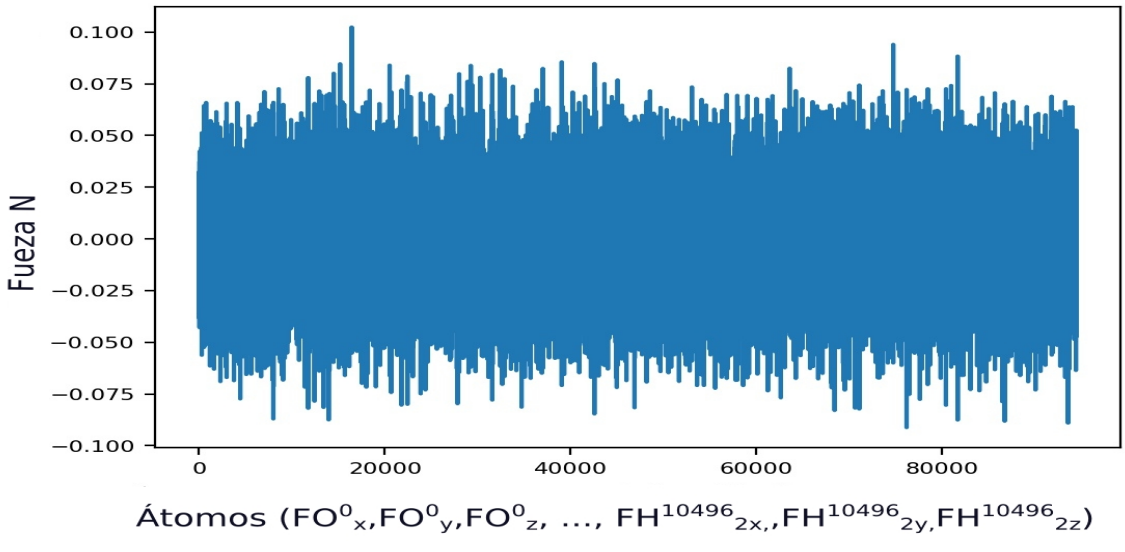
Antes de poder emplear una RNA primero es necesario encontrar una relación entre las posiciones iniciales x, y, z de los, 31488 átomos respecto a las fuerzas resultantes Fx, Fy, Fz de cada molécula de agua, es decir, decodificar la información intrínseca de los átomos de agua dentro del contenedor. Comencemos entonces por analizar el comportamiento de los átomos, para lo cual, la siguiente gráfica 4.0.3 muestra su distribución espacial en el primer cuadro tiempo. En la cual, las abscisas representan los valores de sus coordenadas x, y, z en Armstrong($O_x^0 = 2{,}2, O_y^0 = -3{,}1, O_z^0 = -1{,}9, ..., H_{1x}^{2500} = 12{,}2, ...$). Las ordenadas simbolizan el orden posicional ($O_x^0 = 0, O_y^0 = 1, O_z^0 = 3, ..., H_z^1 0496 = 94464$).

Figura 4.0.3: Distribución de las posiciones iniciales de los átomos en el cuadro de tiempo $t = 0$



A partir de estas posiciones iniciales y tras realizar los cálculos correspondientes, se obtienen las siguientes distribuciones de las fuerzas totales $Fx, Fy, Fz = F_{Coulomb} + F_{LJ}$. Asimismo, veamos su distribución espacial en la gráfica 4.0.4.

Figura 4.0.4: Distribución de las fuerzas resultantes en el cuadro de tiempo $t = 0$



Como podemos apreciar en las gráficas anteriores, no existe ningún patrón evidente entre las posiciones iniciales y las fuerzas resultantes, por lo que es necesario quitar aleatoriedad a los datos para así facilitar en entrenamiento de la RNA, así como asegurar una correcta predicción.

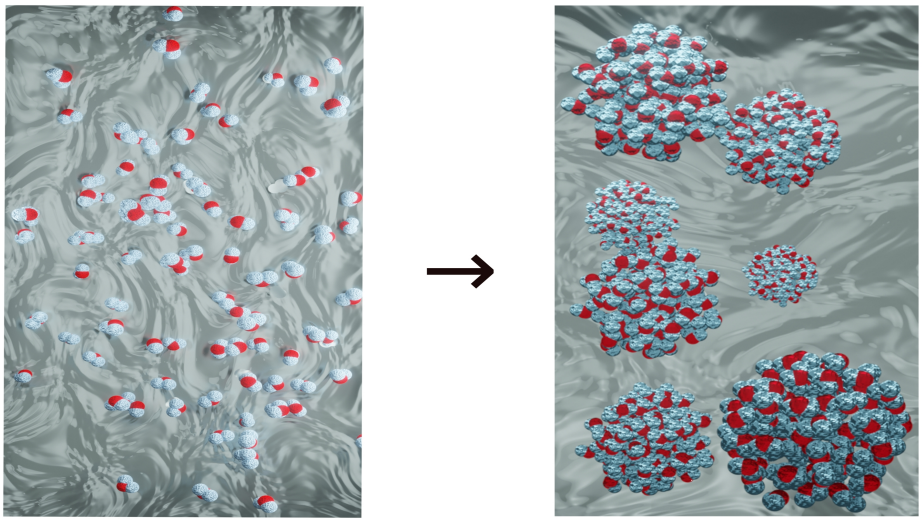
Una de las técnicas más comunes para este tipo de problemas es la de dividir y conquistar, la cual, consta en separar un sistema en pequeños fragmentos tanto como sea posible, con el fin de simplificar el medio, de tal forma que la resolución de este se torne simple. La idea de aplicar este método es encontrar una serie de cúmulos de agua, los cuales tengan la capacidad de describir todo el medio con un número limitado de moléculas como se representa en la imagen 4.0.5.

La técnica de dividir y conquistar en este caso se realizó por medio de seleccionar un átomo de oxígeno con el cual, se calcularon las distancias respecto a los demás oxígenos (ver ecuación 4.0.3). Estas distancias se ordenaron de menor a mayor con el fin de solo seleccionar las primeras 100 distancias más cercanas. Se tomaron a los oxígenos como referencia debido a que se buscaba obtener cúmulos de agua completos $O - H - H$.

$$\begin{aligned} d_1(O_c, O^0) &= \sqrt{(O_x^0 - O_{x_c})^2 + (O_y^0 - O_{y_c})^2 + (O_z^0 - O_{z_c})^2} \\ d_2(O_c, O^1) &= \sqrt{(O_x^1 - O_{x_c})^2 + (O_y^1 - O_{y_c})^2 + (O_z^1 - O_{z_c})^2} \\ d_{10496}(O_c, O^{10496}) &= \sqrt{(O_x^{10496} - O_{x_c})^2 + (O_y^{10496} - O_{y_c})^2 + (O_z^{10496} - O_{z_c})^2} \end{aligned} \tag{4.0.3}$$

Donde O_c es el oxígeno seleccionado, O^n el recorrido de todos los elementos del contenedor.

Figura 4.0.5: Partición del contenedor de agua donde, cada cúmulo simboliza un vecindario



Dentro de la metodología de ordenamiento, existen varios algoritmos diseñados para esta tarea (ordenamiento de burbuja, de selección, de inserción, listas ligadas, push y pop, etc.), cada uno con diferentes cualidades. No obstante, en nuestro caso, se busca obtener el menor tiempo de ejecución posible. Aunque, el ordenamiento es una tarea primordial, el objetivo principal es encontrar el identificador de los átomos que se encuentran a menor distancia. Si bien todos los algoritmos pueden modificarse para obtener este identificador, suelen perder un poco de eficiencia al hacerlo. Dado que el tiempo es primordial, se optó por un procedimiento en una *unidad de procesamiento de gráficos (GPU)* con el lenguaje de programación en paralelo *Compute Unified Device Architecture (CUDA)*. La siguiente tabla muestra el tiempo necesario para calcular todos los vecindarios de 100 moléculas de agua en un cuadro de tiempo con 10496 oxígenos, utilizando CPU, multi-CPU mediante *Message Passing Interface* MPI, GPU, multi-GPU (ver apéndice 8.3):

Cuadro 4.1: Tiempo de procesamiento por 10496 átomos de oxigeno

Tecnologías	tiempo	procesadores
$CPU - Python$	45_{minutos}	1
$Multi - CPU - MPI$	$40_{segundos}$	16
$GPU - CUDA$	$8_{segundos}$	82 bloques, 128 hilos
$Multi - GPU - CUDA$	$3_{segundos}$	82 bloques, 128 hilos
$GPU - NUMBA - Python$	$10_{segundos}$	82 bloques, 128 hilos

Recordar que estos tiempos pueden variar, dependiendo del equipo de cómputo empleado, así como, la tecnología que utilicen los procesadores (Intel o Nvidia).

Para entender mejor cómo es que se llegaron a estos tiempos de procesamiento, hagamos un pequeño paréntesis para hablar de la implementación con el programa con CUDA, ya que

este fue el lenguaje con el que se obtuvieron los mejores resultados. Para utilizar CUDA, primero es necesario conocer el hardware del GPU con el que se está trabajando. Aunque no todos las GPU son iguales, la mayoría tiene una configuración como la que se ve en el apéndice 8.2

Ya entendido el funcionamiento básico de cada uno de los componentes de la o las GPU con las que se trabajarán, es posible implementar un núcleo (kernel) con la capacidad de encontrar un vecindario con 100 moléculas de agua. Considerar como hipótesis que un vecindario de 100 elementos, tendrá la capacidad de describir todas las fuerzas que percibe un átomo respecto a todo el contenedor. El núcleo utilizado podrá ser definido como un método en cualquier lenguaje de programación, pero en este caso, los parámetros a emplear podrán utilizar la memoria compartida (usualmente vectores) de la GPU.

La programación dentro del núcleo CUDA suele encontrar en primera instancia al identificador del hilo de procesamiento nos encontramos. Como en CUDA cada procesador trabaja en paralelo y de manera asíncrona, la forma de encontrar nuestro hilo es la siguiente:

$$indice = blockIdx.x * blockDim.x + threadIdx.x \tag{4.0.4}$$

Donde *indice* es el hilo $1, 2, 3, ...n$ en el que nos encontramos, blockIdx es identificador del bloque $1, 2, 3, ..., n$, blockDim es el tamaño de nuestro bloque (también se les nombra como casillas) CUDA y threadIdx es identificador del hilo. Normalmente, estos últimos dos tienen tamaño de 256.

Si se emplea más de una GPU, es posible bloquear los hilos de trabajo de cada una de ellas (ver ecuación 4.0.5). Esta acción requiere que nuestro kernel tenga limitadores que permitan generar este sesgo. De esta forma fue posible obtener el mejor tiempo de ejecución.

$$if(limite_{inferior} <= indice \;\&\&\; indice <= limite_{superior}) \tag{4.0.5}$$

Una forma más de utilizar el índice, es emplearlo para encontrar al oxígeno central. Este oxígeno será utilizado como referencia para encontrar a todo un vecindario como se muestra a continuación:

$$\begin{aligned} O_{x_c} &= atomos_{contenedor}[indice * 9 + 0] \\ O_{y_c} &= atomos_{contenedor}[indice * 9 + 1] \\ O_{z_c} &= atomos_{contenedor}[indice * 9 + 2] \end{aligned} \tag{4.0.6}$$

De esta forma, si nos encontramos en el índice $1, 21, 13, ..., n$ también, nos encontraremos en el átomo central $1, 21, 13, ..., n$. Como solo queremos utilizar a los oxígenos como centrales, se realiza una multiplicación por 9, ya que, cada molécula está compuesta por 9 posiciones

(ver ecuación 4.0.1).

Una forma simple de encontrar el orden adecuado de las distancias 4.0.3, así como, obtener el identificador del los primeros 100 vecinos, es crear un vector temporal que funcione como validador, de esta forma conocer si ya se encontró la menor de las distancias o bien es una distancia repetida.

Cuadro 4.2: Vector temporal para validar las distancias

Vector validador

1	0	0	0	0	....	0	0
0	1	2	3	4	....	10494	10495

Vector de distancias

0,2	2,2	0,5	0,8	8,22	....	0,23	0,5
0	1	2	3	4	....	10494	10495

Donde el valor 1, representa una distancia previamente encontrada, por lo que, se tomará alguna otra del vector de distancias. (ver el núcleo completo en el apéndice 8.1.1 o 8.1.2)

Para invocar al núcleo previamente programado, es preciso especificar en el código principal (main), el número de hilos y el número de bloques que queramos habilitar en la GPU. El producto de multiplicar estas variables dará como resultado el número de hilos de procesamiento que utilizaremos (ver ecuación 4.0.7). Como cada hilo ejecuta un núcleo y cada hilo se procesa en paralelo, el tiempo de procesamiento es mínimo (ver cuadro 4.0.5).

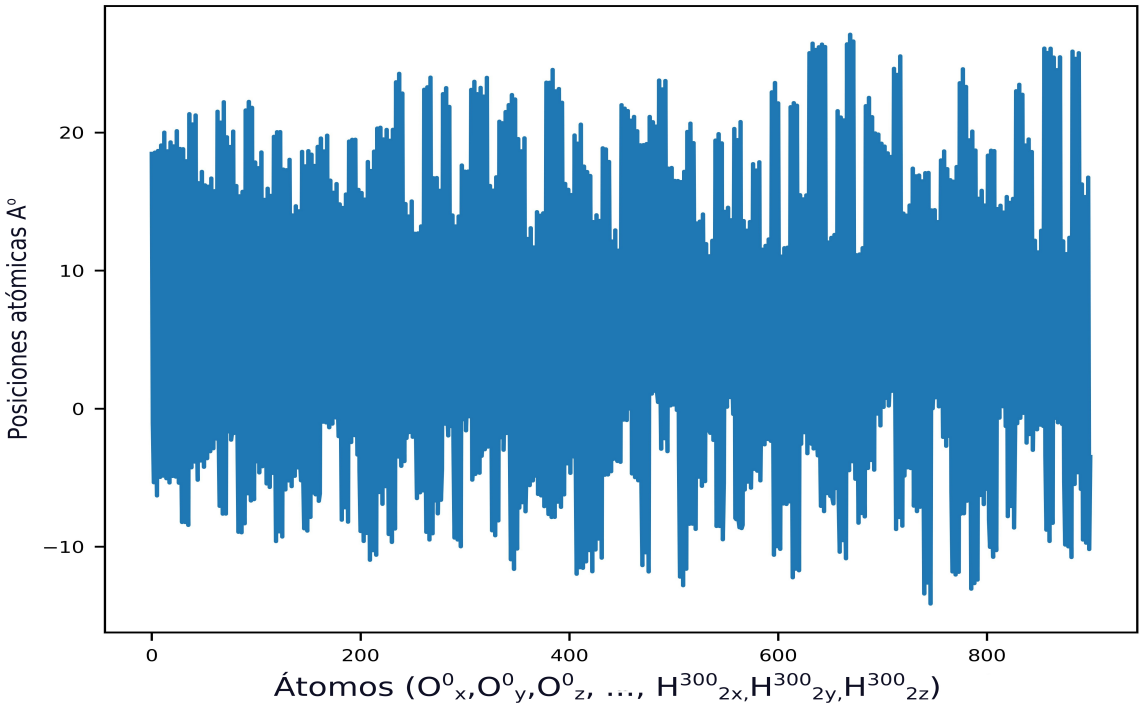
$$N_{hilosProces} = N_{Bloques} * N_{Hilos} \tag{4.0.7}$$

En nuestro caso, 128 bloques $*82$ hilos $= 10496$ núcleos CUDA para los 10496 átomos de oxígeno.

Aunque este código se implementó en un principio en $Fortran + CUDA$ (ver apéndice 8.1.2), también se realizó en $Python + CUDA$ donde la implementación del código se torna más sencilla (ver apéndice 8.1.1).

Tras aplicar el procedimiento anterior, se aumentó el tamaño de los elementos por cien, debido a que, los vecindarios pueden tener elementos repetidos, pero estos interactúan de forma diferente con el átomo central. Pese al incremento, se consiguió un orden mucho más estable, como se muestra en la gráfica 4.0.6, donde las posiciones están contenidas entre los valores 0 y 10 Armstrong.

Figura 4.0.6: Distribución del primer vecindario respecto al oxigeno central en el cuadro de tiempo $t = 0$



4.1. Descripción uniforme de los vecindarios respecto a un átomo de oxígeno central

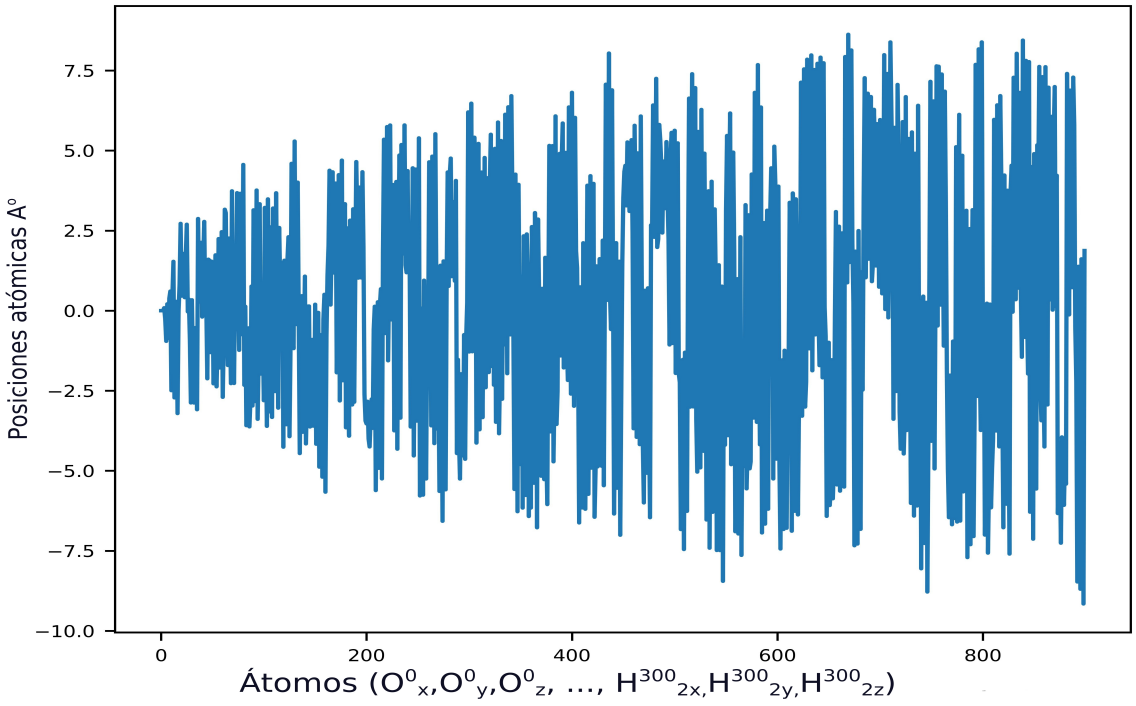
Consideremos ahora la forma individual de cada vecindario. Si bien, la estructura es parecida, en ningún caso es igual. Esta forma característica, aunque en un principio dependía del contenedor, ahora no lo hace, lo cual, otorga la posibilidad de simplificar el cúmulo realizando un desplazamiento al origen (ver ecuación 4.1.1), sin perder su estructura característica. El código empleado en esta sección se encuentra en el apéndice 8.1.3

$$\begin{aligned} x_0 &= x_n - Ox_c \\ y_0 &= y_n - Oy_c \\ z_0 &= z_n - Oz_c \end{aligned} \tag{4.1.1}$$

Donde $O_{x_c}, O_{y_x}, O_{z_c}$ es la posición del oxígeno central, x_n, y_n, z_n son las coordenadas de los demás átomos del vecindario y x_0, y_0, z_0 las coordenadas respecto al origen $0, 0, 0$.

La siguiente gráfica 4.1.1 muestra el comportamiento de los datos después de aplicar el desplazamiento. Notemos ahora que, los datos presentan un ordenamiento similar a una hipérbola horizontal, pero únicamente sobre los átomos de oxígeno debido al procedimiento de los 100 más cercanos. Aunque los hidrógenos generan ruido, no alteran de ninguna manera esta nueva estructura característica de las aguas. A modo de comparación con la gráfica 4.0.6 no pensemos que la forma del vecindario cambió, sino que, simplemente, se ordenó.

Figura 4.1.1: Distribución y posicionamiento al origen del primer vecindario en el cuadro de tiempo $t = 0$



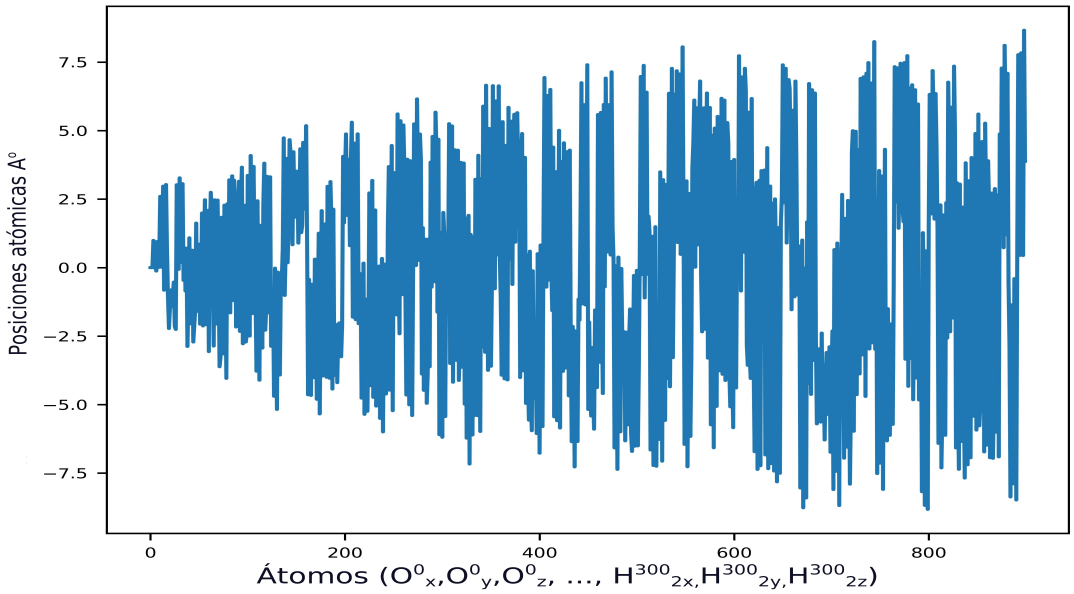
Para simplificar aún más el sistema, se efectuó una rotación sobre los ejes coordenados y, z, de modo que, los hidrógenos se encuentren, sitúen sobre el plano x, y. Esta rotación genera que los primeros átomos tengan un valor igual a cero (ver resultados 4.1.2). Empleando las matrices de rotación 4.1.3 (Goldstein H, 2014 [5]), y considerando el octeto donde se encuentra el átomo, se obtuvo una mejor distribución como se muestra en la imagen 4.1.2.

$$\begin{aligned} &O_{x_0^0} = 0, O_{y_0^0}, O_{z_0^0} \rightarrow \text{Desplazamiento al origen} \\ &H^0_{1y_0} = 0, H^0_{1z_0} = 0 \rightarrow \text{Rotación sobre los planos } y, z \\ &H^0_{2z_0} = 0 \end{aligned} \tag{4.1.2}$$

De este modo, las componentes $O_{z_0^0}, H^0_{2z_0} = 0$ en la primera molécula de agua dentro de todos los vecindarios siempre serán nulas, lo que en principio mejoraría la predicción al no depender de estas coordenadas.

$$
\begin{aligned}
ROT(x,y,\theta) &= \begin{bmatrix} \cos(\theta) & \sin(\theta) & 0 \\ -\sin(\theta) & \cos(\theta) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} \quad \begin{aligned} x' &= x\cos(\theta) + y\sin(\theta) \\ = y' &= -x\sin(\theta) + y\cos(\theta) \\ z' &= z \end{aligned} \\
ROT(x,z,\theta) &= \begin{bmatrix} \cos(\theta) & 0 & \sin(\theta) \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin(\theta) & 0 & \cos(\theta) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} \quad \begin{aligned} x' &= x\cos(\theta) + z\sin(\theta) \\ = y' &= y \\ z' &= -x\sin(\theta) + z\cos(\theta) \end{aligned} \\
ROT(y,z,\theta) &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(\theta) & \sin(\theta) \\ 0 & -\sin(\theta) & \cos(\theta) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} \quad \begin{aligned} x' &= x \\ = y' &= y\cos(\theta) + z\sin(\theta) \\ z' &= -y\sin(\theta) + z\cos(\theta) \end{aligned}
\end{aligned}
\tag{4.1.3}
$$

Figura 4.1.2: Distribución tras la rotación sobre los ejes y, z del primer vecindario en el cuadro de tiempo $t = 0$



Si bien, la gráfica anterior ya cuenta con un comportamiento relativamente ordenado al siempre tener un punto de origen en $0, 0, 0$, al siempre tener un incremento controlado de las distancias, aún no podremos decir que al entrenar una RNA con estos datos obtengamos una predicción correcta, por ello, se aplicó un cambio de coordenadas cartesianas x, y, z, a un sistema de coordenadas polares r, θ, ϕ (ver ecuaciones 4.1.4, 4.1.5 , 4.1.6)

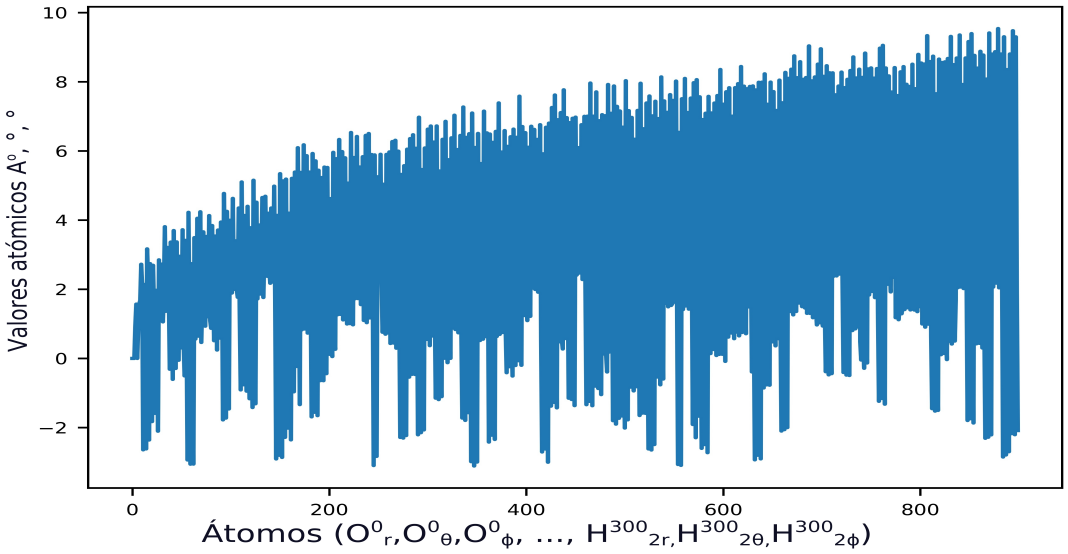
$$
r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \tag{4.1.4}
$$

$$\theta = \arccos(\frac{z}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}) = \arccos(\frac{z}{r}) = \begin{cases} \arctan\frac{\sqrt{x^2+y^2}}{z} & si \quad z > 0 \\ \pi + \arctan\frac{\sqrt{x^2+y^2}}{z} & si \quad z > 0 \\ +\frac{\pi}{2} & si \quad z = 0 \ _y \ x, y \neq 0 \\ Indefinido & si \quad x = y = z = 0 \end{cases} \tag{4.1.5}$$

$$\phi = \arccos(\frac{x}{\sqrt{x^2+y^2}}) = \begin{cases} \arctan(\frac{y}{x}) & si \quad x > 0 \\ \arctan(\frac{y}{x}) + \pi & si \quad x < 0 \ _y \ y \geq 0 \\ \arctan(\frac{y}{x}) - \pi & si \quad x < 0 \ _y \ y < 0 \\ +\frac{\pi}{2} & si \quad x = 0 \ _y \ y > 0 \\ -\frac{\pi}{2} & si \quad x = 0 \ _y \ y < 0 \\ Indefinido & si \quad x = 0 \ _y \ y = 0 \end{cases} \tag{4.1.6}$$

El cambio a este sistema de coordenadas polares generó la siguiente distribución.

Figura 4.1.3: Distribución tras la transformación r, θ, ϕ del primer vecindario en el cuadro de tiempo $t = 0$



Salta a la vista que se han desplazado la mayor parte de los datos negativos, y a diferencia de la gráfica 4.1.2 los datos ahora generan una aglomeración positiva, lo cual, nos habla de que los datos tienen muy poca variación entre sí, por ende menor cantidad de ruido.

Dado que r representa la distancia, si separamos esta componente de los datos anteriores (ver gráfica 4.1.4) observaremos que acabamos de obtener un aproximado de las mismas distancias que calculamos al obtener los 100 vecinos más cercanos (ver gráfica 4.1.5).

Figura 4.1.4: Distribución en r del primer vecindario en el cuadro de tiempo $t = 0$

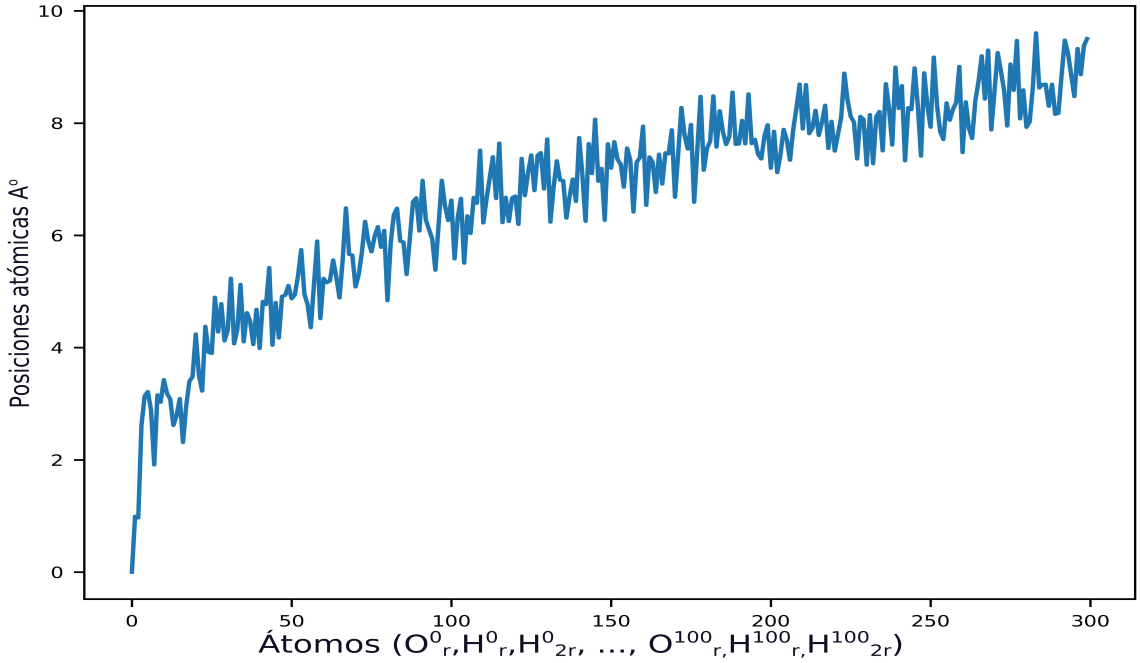
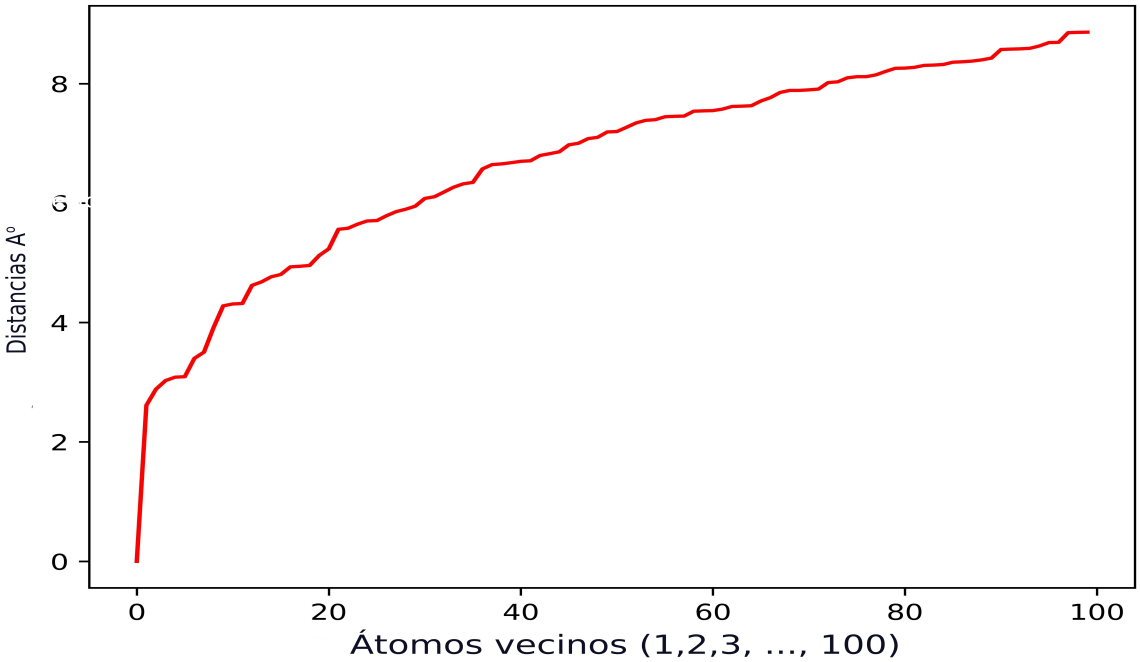


Figura 4.1.5: Distribución de las distancias del primer vecindario



Obtengamos entonces la distribución de la separación tanto de θ (ver gráfica 4.1.6) como de ϕ (ver gráfica 4.1.7).

Figura 4.1.6: Distribución en θ del primer vecindario en el cuadro de tiempo $t = 0$

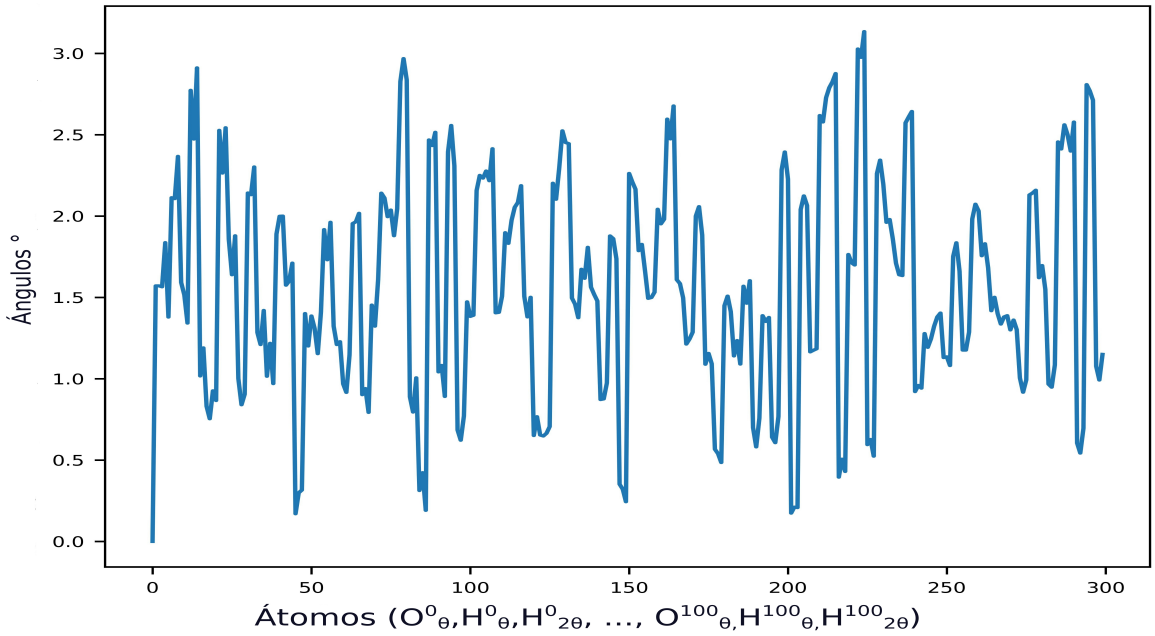
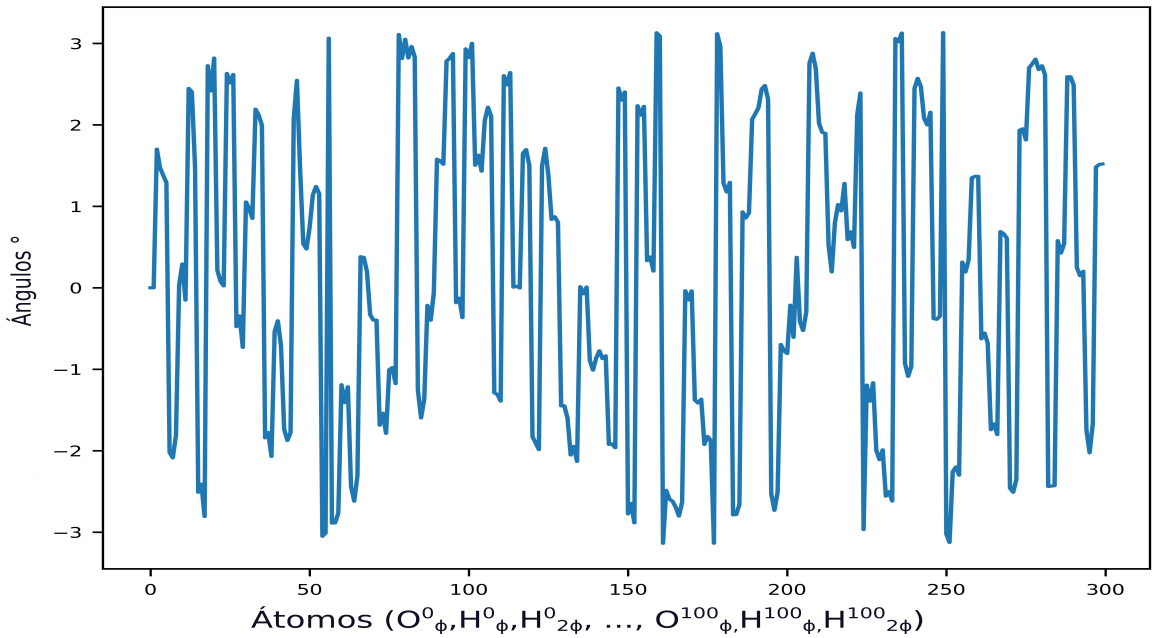


Figura 4.1.7: Distribución en ϕ del primer vecindario en el cuadro de tiempo $t = 0$



4.2. Filtro para corrección de errores

En toda la sección anterior se analizaron las posiciones de cada molécula haciendo una transformación una y otra vez. Intentado encontrar un patrón en estos datos, sin embargo, no se obtuvo nada concreto. Siendo este el caso, no intentemos cambiar la estructura de los datos, si no, la forma en como los vemos. Si cada separación de r, θ, ϕ tiene la misma longitud de 300 valores numéricos, pensemos entonces que podemos usar estos valores como vectores y conviértelos en matrices de 15×20, que a su vez, si les asignamos una escala de color estas pasarán a hacer imágenes (ver transformación 4.3.2).

Ejemplo de la transformación de los vectores r, θ, ϕ a matrices

$$\underset{\text{Vector } r}{\begin{bmatrix} 0{,}55 & 0{,}99 & 5{,}3 & 3{,}0 & 5{,}235 & .. & .. & 7{,}34 \end{bmatrix}} \rightarrow \underset{\text{Matriz } r}{\begin{bmatrix} 0{,}55 & 0{,}99 & ... & 4{,}34 \\ 2{,}53 & 3{,}45 & ... & 6{,}7 \\ 6{,}55 & 3{,}99 & ... & 3{,}0 \\ ... & ... & ... & ... \\ 4{,}66 & 4{,}99 & ... & 7{,}34 \end{bmatrix}}$$

$$\underset{\text{Vector } \theta}{\begin{bmatrix} 0{,}2 & 0{,}9 & 1{,}3 & 1{,}0 & 0{,}235 & .. & .. & 1{,}34 \end{bmatrix}} \rightarrow \underset{\text{Matriz } \theta}{\begin{bmatrix} 0{,}2 & 0{,}9 & ... & 2{,}34 \\ 0{,}3 & 4{,}5 & ... & 3{,}7 \\ 0{,}55 & 2{,}9 & ... & 1{,}0 \\ ... & ... & ... & ... \\ 0{,}66 & 4{,}9 & ... & 1{,}34 \end{bmatrix}}$$

$$\underset{\text{Vector } \phi}{\begin{bmatrix} 1{,}2 & 2{,}9 & 1{,}09 & 0{,}05 & 0{,}005 & .. & .. & 0{,}14 \end{bmatrix}} \rightarrow \underset{\text{Matriz } \phi}{\begin{bmatrix} 1{,}2 & 2{,}9 & ... & 2{,}34 \\ 1{,}3 & 3{,}5 & ... & 0{,}7 \\ 0{,}05 & 0{,}91 & ... & 0{,}03 \\ ... & ... & ... & ... \\ 0{,}06 & 0{,}9 & ... & 0{,}14 \end{bmatrix}}$$

Esta es solo una representación de cómo sería la transformación de las matrices reales, debido a que es imposible colocar los 300 valores de estas. El código de cómo se realizó esto se encuentra en el apéndice 8.1.5 cuadro 5, donde se emplea la función reshape para hacer esta acción.

Las matrices conseguidas, si las consideramos como imágenes, nos permitirán aplicar el método de suavizado, el cual consta en transformar una imagen que presenta cierta inconsistencia en los datos (desface o un ruido), en una imagen sin defectos bruscos. La inconsistencia en los datos de una imagen está dada por la continuidad de cada píxel respecto a sus vecinos.

Para toda imagen f(x,y) donde y son las columnas y x el número de filas en una imagen, se le aplicará un operador T, de tal forma que el resultado g(x,y) sea una imagen ya procesada (suavizada) (González R, 2018 [6]).

$$g(x, y) = T(f(x, y)) \tag{4.2.1}$$

El operador T consta de una matriz cuadrada de tamaño $n \times n$. Este operador realizará un recorrido por toda la imagen que queramos suavizar mediante una serie de convoluciones, dando así como resultado una nueva imagen $g(x, y)$ (ver ecuación 4.2.2). El operador que usemos nunca deberá exceder en tamaño a nuestra imagen.

$$g(x, y) = \sum_{u=0}^{n} \sum_{v=0}^{n} T(u, v)F(x + u, y + v) \tag{4.2.2}$$

Donde n es el tamaño de la matriz del operador T

En esta ocasión se prefirió emplear al operador T como un filtro promedio, el cual, consta de una matriz con todos sus valores iguales. El objetivo del filtro consta en remplazar una pequeña sección de la imagen por la suma promedio de esta sección. El nuevo valor generado dará como resultado una imagen con continuidad, o sea suavizada. Aunque el resultado tras aplicar el operador pareciera que altera el tamaño de la imagen original, este método no lo hace, ya que, es capaz de generar ceros en los contornos de la imagen original para así no alterar su tamaño. A esta técnica se le conoce como relleno.

Para la imagen construida a partir de la matriz r se utilizó el siguiente operador $T = [4 \times 4] \cdot 1/15$.

Matriz ejemplo					Operador T					Suavizado			
0,55	0,99	...	4,34		1/15	1/15	1/15	1/15		0,37	0,73	...	1,02
2,53	3,45	...	6,7		1/15	1/15	1/15	1/15		2,03	0,56	...	1,78
6,55	3,99	...	3,0	$\times$	1/15	1/15	1/15	1/15	$\rightarrow$	1,43	0,93	...	3,93
...	...	...	...		1/15	1/15	1/15	1/15		...	...	...	...
4,66	4,99	...	7,34							3,37	2,33	...	1,0

Para la imagen construida a partir de la matriz θ se utilizó el siguiente operador $T = [5 \times 5] \cdot 1/13$.

Matriz ejemplo					Operador T						Suavizado			
0,05	3,99	...	2,34		1/13	1/13	1/13	1/13	1/13		1,7	0,3	...	0,2
1,53	0,45	...	5,7		1/13	1/13	1/13	1/13	1/13		1,03	0,6	...	2,78
2,55	0,99	...	1,0	$\times$	1/13	1/13	1/13	1/13	1/13	$\rightarrow$	2,43	0,93	...	0,93
...	...	...	...		1/13	1/13	1/13	1/13	1/13		...	...	...	...
3,66	1,99	...	0,34		1/13	1/13	1/13	1/13	1/13		2,37	0,33	...	0,01

Aunque se intentó aplicar un filtro de suavizado sobre la imagen ϕ, no se consiguió ningún resultando favorable sobre los datos, por lo que, no se le aplicó.

Los datos resaltados en rojo de las matrices anteriores solo son un ejemplo de como es que funciona la convolución, no son los datos reales. Por otro lado, el operador T tanto para r como para θ si son los operadores reales empleados en las imágenes r, θ, ϕ originales (ver la imagen 4.3.2)

4.3. Filtro de resalte de bordes

Prosiguiendo con la extracción de la información, se decide aplicar un filtro conocido como resalte de bordes. Este consta de emplear dos métodos para su aplicación:

El primer método se trata de un filtro Gaussiano, que suavizará la imagen promedio total.

La función Gaussiana es aproximada a los filtros binomiales que se obtienen a partir del triángulo de pascal. Esta función tiene la siguiente forma:

$$f(x) = N\epsilon^{-ax^2} \tag{4.3.1}$$

Donde N es una constante de normalización que depende de a que en su forma estándar normalmente tiene un valor de $a = 1/2\sigma^2$

Para obtener un filtro binomial es necesario aplicar la siguiente función binomial:

$$f_N(x) = \begin{bmatrix} N \\ x \end{bmatrix} \frac{N!}{x!(N-x)!} \tag{4.3.2}$$

Donde N en este caso es el orden del filtro deseado.

Los filtros binomiales son separables y convolucionales, por lo que podemos generar un filtro primero en dirección de x y luego en dirección de y. Si convolucionamos un filtro x consigo mismo, este generará un filtro de segundo orden.

$$f_2(x) \cdot f_2(x) = f_4(x) \tag{4.3.3}$$

Un filtro binomial de dos dimensiones se genera a partir de:

$$[f_N(x)]^T \times [f_N(x)] \tag{4.3.4}$$

por ejemplo: un filtro de orden 2.

$$\begin{bmatrix}1\\2\\1\end{bmatrix} \times \begin{bmatrix}1 & 2 & 1\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}1 & 2 & 1\\2 & 4 & 2\\1 & 2 & 1\end{bmatrix} \tag{4.3.5}$$

Estos filtros normalmente se normalizan para no alterar la imagen.

$$\frac{1}{16}\begin{bmatrix}1 & 2 & 1\\2 & 4 & 2\\1 & 2 & 1\end{bmatrix} \tag{4.3.6}$$

Este núcleo binomial lo podemos aplicar como un filtro gaussiano por la similitud. Un filtro gaussiano en forma depende de su dimensión y tiene la siguiente forma:

Para una dimensión

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\cdot\sigma}e^{-(\frac{x^2}{2\sigma^2})} \tag{4.3.7}$$

Para dos dimensiones

$$f(x,y) = \frac{1}{2\pi\cdot\sigma^2}e^{-(x^2+y^2/2\sigma^2)} \tag{4.3.8}$$

Para N dimensiones

$$f(\vec{x}) = \frac{1}{(\sqrt{2\pi}\cdot\sigma)^N}e^{-(|x|^2/2\sigma^2)} \tag{4.3.9}$$

Donde σ es el valor de suavizado de imagen, entre mayor sea este valor, mayor será el suavizado. Por lo contrario, entre menor sea, menor será la reducción del ruido.

El segundo método es el de la derivada digital. Este filtro asigna la variación de una imagen con el valor de 1, y, por el contrario, cuando existen valores constantes, se asigna el valor de 0. Como la dirección de la imagen puede estar dada por el eje x o por el eje y es necesario realizar una derivada parcial respecto a estos ejes x, y. (ver ecuación 4.3.10)

$$\bigtriangledown f(x,y) = \begin{bmatrix}g_x\\g_y\end{bmatrix} \quad \begin{matrix}g_x = \dfrac{\partial f(x,y)}{\partial x} = f(x,y) - f(x-1,y)\\ g_y = \dfrac{\partial f(x,y)}{\partial y} = f(x,y) - f(x,y-1)\end{matrix} \tag{4.3.10}$$

O bien podemos aplicar su forma matricial de la misma forma como se aplicó el operador T en la sección anterior:

Matriz ejemplo		Derivada digital en dirección de x		Resalte de bordes

$$\begin{bmatrix} 0{,}37 & 15{,}73 & ... & 7{,}02 \\ 8{,}03 & 1{,}56 & ... & 3{,}78 \\ 4{,}43 & 2{,}93 & ... & 2{,}93 \\ ... & ... & ... & ... \\ 13{,}37 & 12{,}33 & ... & 17{,}0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} 0 & 0 & ... & 0 \\ 1 & 1 & ... & 0 \\ 0 & 0 & ... & 0 \\ ... & ... & ... & ... \\ 1 & 1 & ... & 1 \end{bmatrix}$$

Matriz ejemplo		Derivada digital en dirección de y		Resalte de bordes

$$\begin{bmatrix} 0{,}37 & 15{,}73 & ... & 7{,}02 \\ 8{,}03 & 1{,}56 & ... & 3{,}78 \\ 4{,}43 & 2{,}93 & ... & 2{,}93 \\ ... & ... & ... & ... \\ 13{,}37 & 12{,}33 & ... & 17{,}0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} 0 & 1 & ... & 0 \\ 0 & 1 & ... & 0 \\ 0 & 0 & ... & 0 \\ ... & ... & ... & ... \\ 1 & 1 & ... & 1 \end{bmatrix}$$

Una vez calculado el vector gradiente, calculamos su módulo como se muestra en la siguiente ecuación:

$$| \bigtriangledown f(x,y)| = \sqrt{g_x^2 + g_y^2} \approx |g_x| + |g_y| \tag{4.3.11}$$

Esta suma generará una matriz donde ya habrá obtenido los datos de mayor intensidad, siendo estos los bordes de la imagen.(ver imagen 4.3.1)

Figura 4.3.1: Ejemplo de la aplicación de filtro binomial - derivada digital en una imagen común [33]

La teoría explicada en toda esta sección no fue posible representarla paso por paso con nuestros datos reales, debido a que la implementación en el lenguaje Python solo abarca unas cuantas líneas. (ver apéndice 8.1.5, cuadro 7)

Las imágenes resultantes de aplicar el filtro de suavizado y el filtro Gaussiano + la derivada digital, mediante Python fueron las siguientes:

Figura 4.3.2: Aplicación de filtros

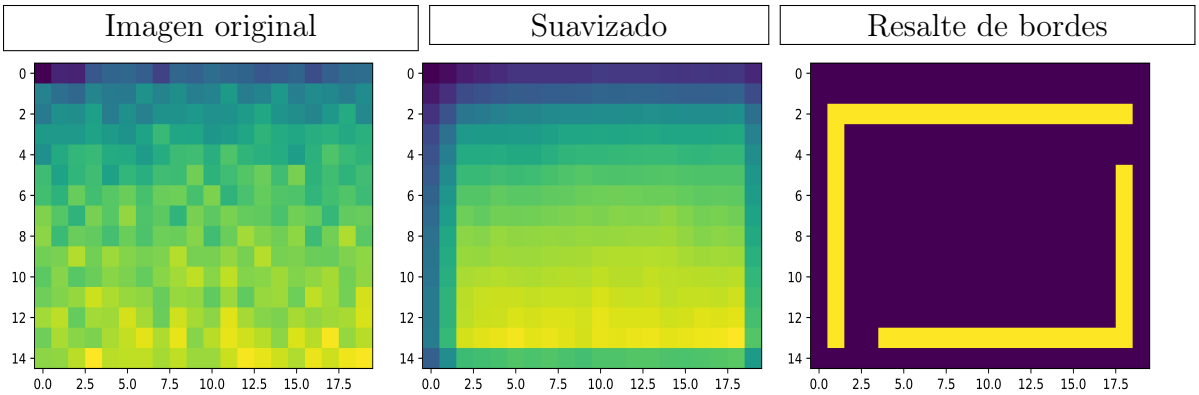


Imagen real r con sus filtros correspondientes.

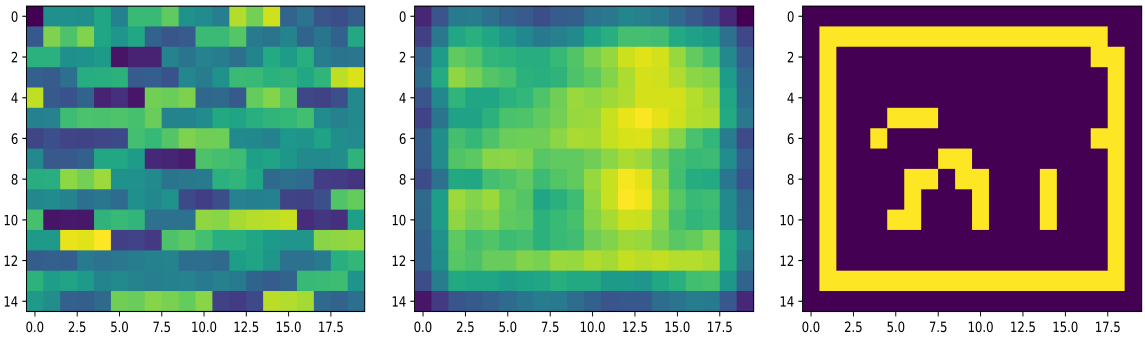


Imagen real θ con sus filtros correspondientes.

Imagen real ϕ con sus filtros correspondientes

Finalmente, y antes de implementar una RNA se aconseja que se genere una distribución aleatoria normal, con nuestros datos de entrenamiento, en virtud de obtener un mejor resultado a la hora de entrenar a nuestro modelo.

4.4. Conversión binaria

Para poder entrenar una RNA sin importar su configuración son necesarias dos cosas, los impulsos iniciales (Entradas) y la respuesta de estos impulsos (Salidas), sin embargo, en las secciones anteriores solo se a trabajado con las posiciones iniciales de nuestras aguas, dejando de lado a las fuerzas totales (fuerzas de Coulomb + fuerzas de LJ), esto es así debido a que el objetivo de una RNA es manipular lo menos posible los resultados esperados, con el único propósito de efectuar la menor cantidad de procesos, por lo que, no es recomendable no alterar estos datos.

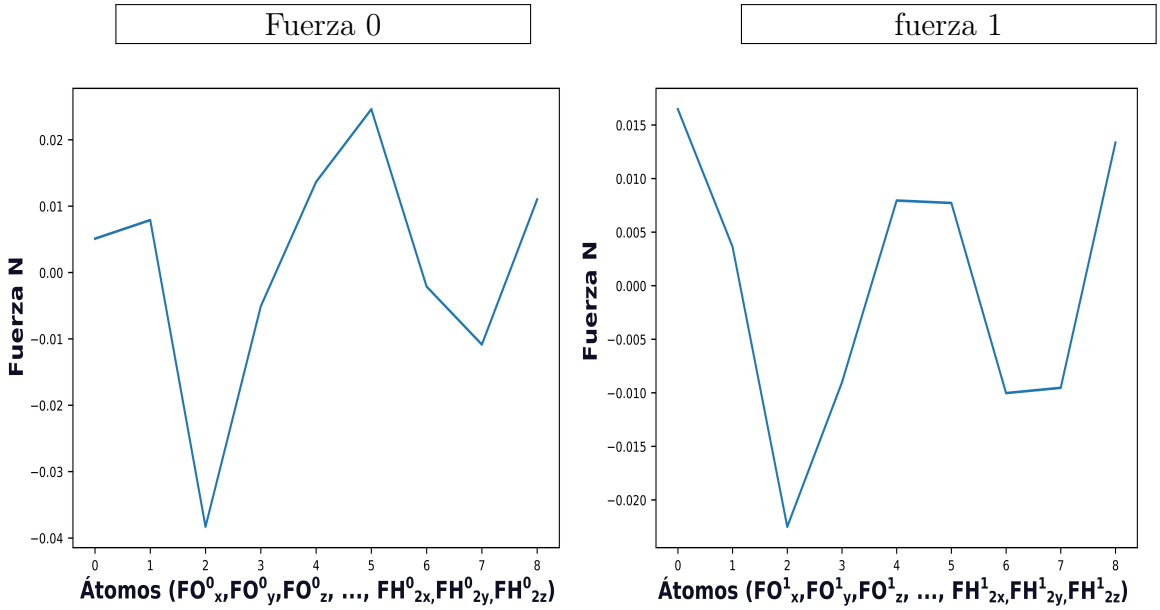
Al revisar las fuerzas resultantes, así como su distribución (ver gráfica 4.0.4), estas fuerzas básicamente son aleatorias. Al no poder modificar estas fuerzas, mejor analicemos su relación respecto a sus posiciones atómicas (ver la configuración 4.4.1), al igual que sus distribuciones espaciales (ver las gráficas 4.4.1).

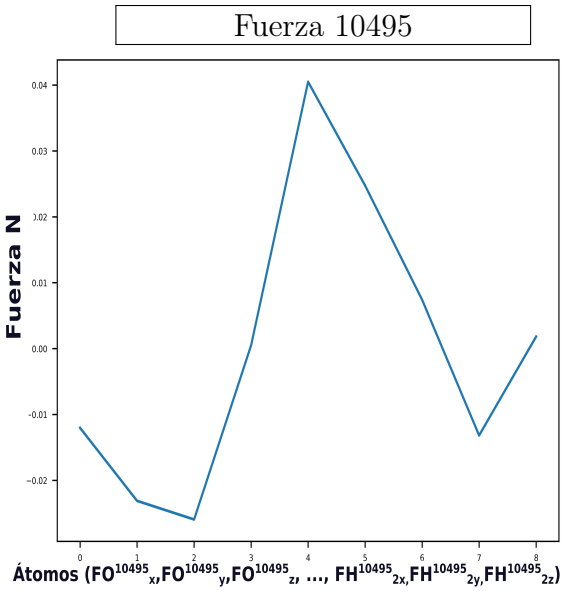
$$FO_x^0, FO_y^0, FO_z^0, FH_{1x}^0, FH_{1y}^0, FH_{1z}^0, FH_{2x}^0, FH_{2y}^0, FH_{2z}^0$$

$$FO_x^1, FO_y^1, FO_z^1, FH_{1x}^1, FH_{1y}^1, FH_{1z}^1, FH_{2x}^1, FH_{2y}^1, FH_{2z}^1$$

$$FO_x^{10496}, FO_y^{10496}, FO_z^{10496}, FH_{1x}^{10496}, FH_{1y}^{10496}, FH_{1z}^{10496}, FH_{2x}^{10496}, FH_{2y}^{10496}, FH_{2z}^{10496} \tag{4.4.1}$$

Figura 4.4.1: Distribución de las fuerzas totales en una molécula de agua en el cuadro de tiempo $t = 0$

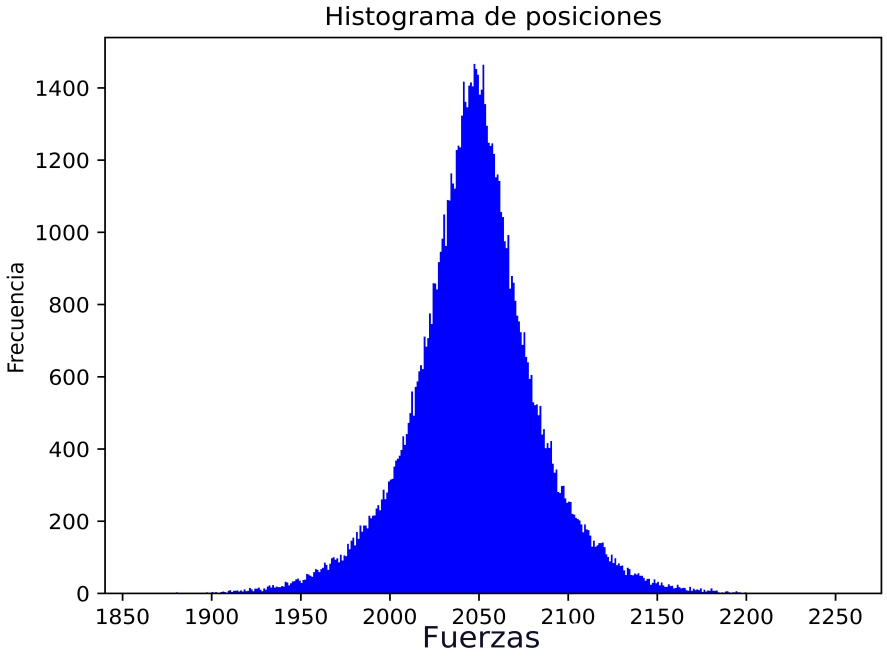




Aunque solo se tratan de nueve fuerzas, en ningún caso se repiten, siendo este un problema a la hora de entrenar nuestra RNA. Si cada fuerza resultante es diferente, la RNA nunca podrá generar una convergencia. Si dos entradas son parecidas, la respuesta a estas entradas no serán parecidas sino totalmente diferentes, por lo que, nunca podrá predecir correctamente. Examinemos entonces que tan similares pueden ser estas fuerzas mediante un histograma. Como la fuerza en ningún momento sobrepasa el rango que va de -1 a 1 newtons, segmentemos este rango en 4095 (ver ecuación 4.4.2) partes para generar el histograma.

$$\text{Saltos de frecuencia} = 2/4095 = 0{,}0004884 \tag{4.4.2}$$

Figura 4.4.2: Distribución de las fuerzas totales de forma individual



La máxima concentración de las fuerzas se halla entre los valores 2040-2060 y su pico sobre los 2050. Si realizamos la conversión, tendremos:

$$\begin{aligned} &0{,}0004884 \cdot 2040 = 0{,}996336 \rightarrow 0{,}996336 - 1 = -0{,}003664 \\ &0{,}0004884 \cdot 2050 = 1{,}001221001 \rightarrow 1{,}001221001 - 1 = 0{,}001221001 \\ &0{,}0004884 \cdot 2060 = 1{,}006104 \rightarrow 1{,}006104 - 1 = 0{,}006104 \end{aligned} \tag{4.4.3}$$

Por lo que, casi toda nuestra información está cercana al cero, y que a su vez es la menos relevante. Por ello, aunque tengamos un sistema casi aleatorio, aún podemos predecir las fuerzas de mayor intensidad, que son las que más afectan a nuestro sistema. Como entre cada sección del histograma no existen más de 200 datos y la variación entre ellos es mínima, podemos tomar sus posiciones dentro de este para hacer una transformación posicional de nuestros datos sin afectarlos bruscamente. Por ejemplo, si la fuerza FO_x^0 fuera igual a $-0{,}45055$ entonces su posición en el histograma sería de 1125. El código para realizar esta transformación se encuentra en el apéndice 8.1.4.

Cuadro 4.3: Vector de fuerzas convertido a un vector de posiciones

$$\begin{bmatrix} FO_x^n & FO_y^n & FO_z^n & FH_{1x}^0 & FH_{1y}^n & FH_{1z}^n & FH_{2x}^n & FH_{2y}^n & FH_{2z}^n \end{bmatrix}_{[1,9]}$$

$$\begin{bmatrix} 1125 & 1155 & 1135 & 1600 & 2620 & 2630 & 2200 & 1260 & 2175 \end{bmatrix}_{[1,9]}$$

Los vectores anteriores muestran un ejemplo de cómo serían las posiciones de las fuerzas de una molécula de agua dentro del histograma.

Para facilitar la perdición de estas fuerzas con forma de Gaussiana, se aplicó una conversión que transforma la posición numérica decimal de la fuerza dentro del histograma, en un sistema de recorrido binario. Se toman las 4095 separaciones por cada fuerza y se genera un vector de ceros de este tamaño, después se toma el valor de la posición dentro de la Gaussiana para activar con unos, solo hasta este valor. El siguiente cuadro da un ejemplo de cómo se realizaría esta transformación.

$$\begin{aligned} &\text{si } FO_x^1 = 3 \rightarrow [1\ 1\ 1\ 0\ 0\ 0\ 0\ ...\ 0\ 0\ 0\ 0\ 0\ 0]_{[1,4095]} \\ &\text{si } FO_x^8 = 6 \rightarrow [1\ 1\ 1\ 1\ 1\ 1\ 0\ ...\ 0\ 0\ 0\ 0\ 0\ 0]_{[1,4095]} \end{aligned} \tag{4.4.4}$$

Aplicando este procedimiento para las 9 fuerzas de una agua, tendríamos la siguiente transformación:

Cuadro 4.4: Vector de posicionamiento convertido a un vector de posiciones binario

$$\begin{bmatrix} 1125 & 1155 & 1135 & 1600 & 2620 & 2630 & 2200 & 1260 & 2175 \end{bmatrix}_{[1,9]}$$

$$\begin{bmatrix} 11..,00 & 11..,00 & 11..,00 & 11..,00 & 11..,00 & 11..,00 & 11..,00 & 11..,00 & 11..,00 \end{bmatrix}_{[1,36855]}$$

Es decir, tendríamos un vector de salida de $9 * 4095 = 36855$ elementos con puros unos y ceros.

Capítulo 5

Especificaciones de la red neuronal

Antes de construir una RNA, primero debemos entender que este procedimiento, pese a lo definido en el capítulo 3, es totalmente incierto. Entonces se deberán encontrar, a prueba y error, el número de capas ocultas, el número de neuronas, las funciones de activación e incluso la tasa de aprendizaje. Sin que esto garantice que la distribución encontrada sea la mejor para nuestro tipo de datos.

Atendiendo lo anterior, se empleó un modelo estructural general proporcionado por TensorFlow y Keras. Estos programas eliminan la construcción manual de los modelos de RNA, dejando a nuestra disposición todas las posibles combinaciones de los parámetros anteriores que pudieran tener estas estructuras.

Las RNA prefabricadas siempre requieren una configuración previa, ya sea la instalación de los controladores, la configuración de nuestro entorno de trabajo, etc. Por ello, si quiere utilizar el código implementado en el apéndice 8.1.5 cuadro 16, primero deberá instalar CUDA, Python, keras, tensorflow, tensorflow-gpu, cuDNN y si trabaja con Linux configurar su .bashrc agregando el path de CUDA.

5.1. Definición de parámetros

Aunque no exista un procedimiento a seguir, sí existen ciertas recomendaciones que podrían facilitar la búsqueda de una configuración idónea. Lo primero es definir un número de neuronas limitado, así como emplear solo tres capas: la de los datos de entrada, la de los datos de salida y solo una capa oculta. Después, debemos utilizar una tasa de aprendizaje muy grande respecto a nuestros datos. Finalmente, aplicar solo una función de activación para todas las capas ocultas. El objetivo es generar un sobreentrenamiento. Al tener una red sobre entrenada, todos aquellos datos que se encontraban fuera del conjunto de entrenamiento generarán una predicción errada. El único fin para generar esto es conocer los límites de nuestros datos, tanto como si son requeridas más neuronas, más capas ocultas o bien nos hemos excedido en nuestra configuración.

En nuestro caso, se usó una función sigmoidea como inicial con 900 neuronas y 100 neuronas en nuestra capa intermedia. También una sigmoidea de salida con 36855 neuronas. Finalmente, una tasa de aprendizaje de 0,1. Debido al tamaño de nuestros datos, no se alcanzó el sobreentrenamiento en el primer intento. Utilizando esta red como pivote, fue posible modificar al modelo para encontrar uno que fuera capaz de generar una predicción lo suficientemente satisfactoria con 10 cuadros de tiempo como datos de entrenamiento.

La siguiente tabla 5.1 muestra las características de la red neuronal encontrada.

Cuadro 5.1: Parámetros utilizados en el modelo de red neuronal

Capa	Función de activación	Número de Neuronas
1	$tanh/entrada$	900
2	$tanh$	4000
3	$tanh$	5500
4	$tanh$	3200
5	$sigmoid$	2000
6	$tanh$	1950
7	$tanh$	900
8	$tanh/salida$	36855

* La capa de salida = 4095 (Número de intervalos de partición de las fuerzas encontradas en el rango que va de [-1,1]) $*9$ (Coordenadas x,y,z de los 3 átomos de la molécula de agua)= 36855

* Capa de entrada = 100 (Vecinos más cercanos convertidos en r,theta,phi) $*9$ (Coordenadas x,y,z de los 3 átomos de la molécula de agua)= 900.

Como cada cuadro de tiempo está compuesto por 31488 coordenadas x, y, z y cada coordenada tiene 100 vecinos, esto nos da un total de 9446400 datos. Debido a que se utilizaron 10 cuadros de tiempo para entrenar al modelo anterior. Entonces tenemos $N_{Datos} = 31488 \cdot 3 \cdot 100 \cdot 10 = 94464000$ datos. Esta fue la cantidad de datos de entrada utilizados para entrenar la red neuronal.

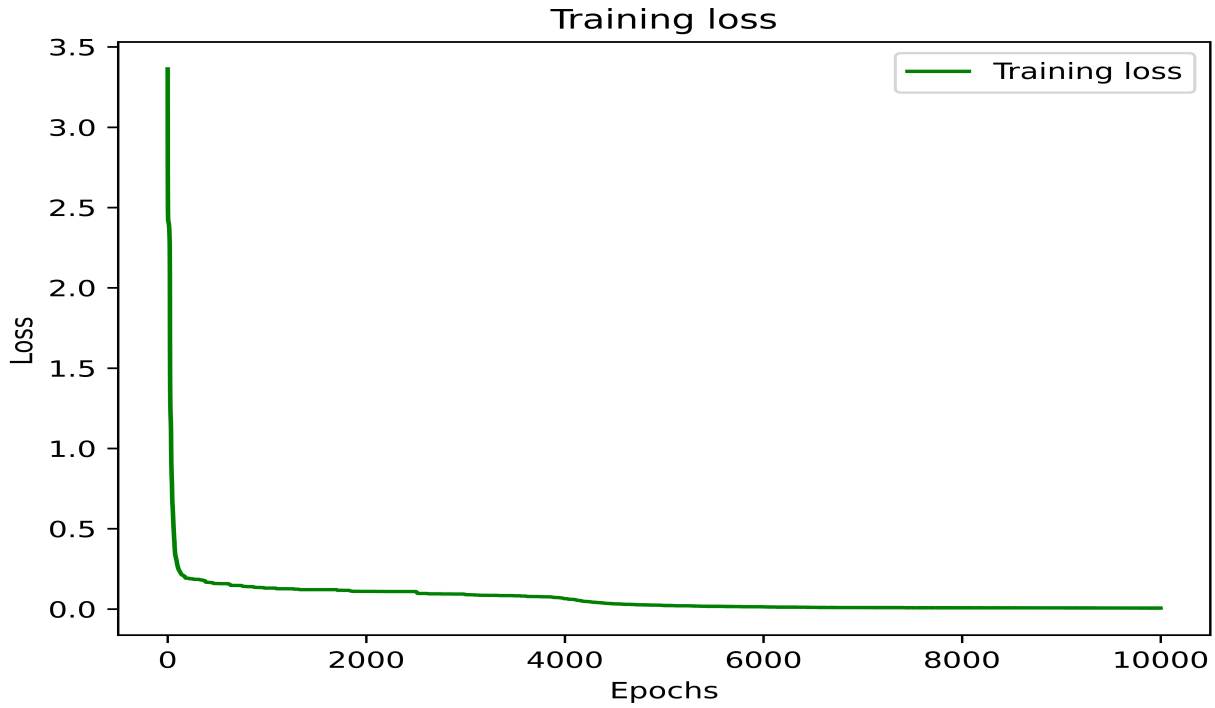
Para los datos de salida o respuesta de la RNA, se utilizan 31488 fuerzas, cada una con su respectiva coordenada x, y, z. A estas fuerzas se les aplicó una transformación binaria con 4095 separaciones (intervalos en la Gaussiana). Esto utilizando los mismos 10 cuadros de tiempo. Teniendo como resultado $N_{DatosSalida} = 31488 \cdot 3 \cdot 4095 \cdot 10 = 3868300800$.

El modelo que se muestra en la tabla anterior, utilizó una tasa de aprendizaje de 0,0001, así como 10000 épocas para su entrenamiento.

Aunque la cantidad de datos parezca realmente grande, solo representa el 10 % de una simulación real. Estos 10 cuadros de tiempo, con sus receptivas salidas, fueron tomados de manera secuencial en toda una simulación, a fin de tener fuerzas con separación continua. Después se realizó una distribución aleatoria entre estos datos.

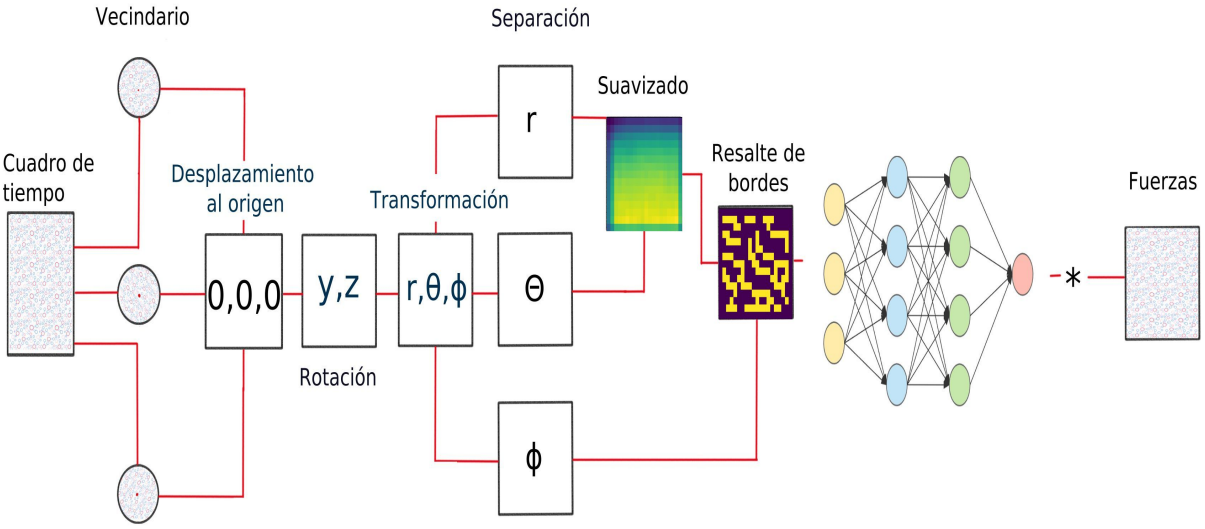
Al entrenar este modelo, se llegó a la máxima capacidad de nuestro equipo de cómputo al emplear toda la Random Access Memory (RAM) disponible y el máximo procesamiento tanto de las GPUs como de los procesadores. De esta manera, se consiguió la siguiente gráfica 5.1.1.

Figura 5.1.1: Resultado del entrenamiento



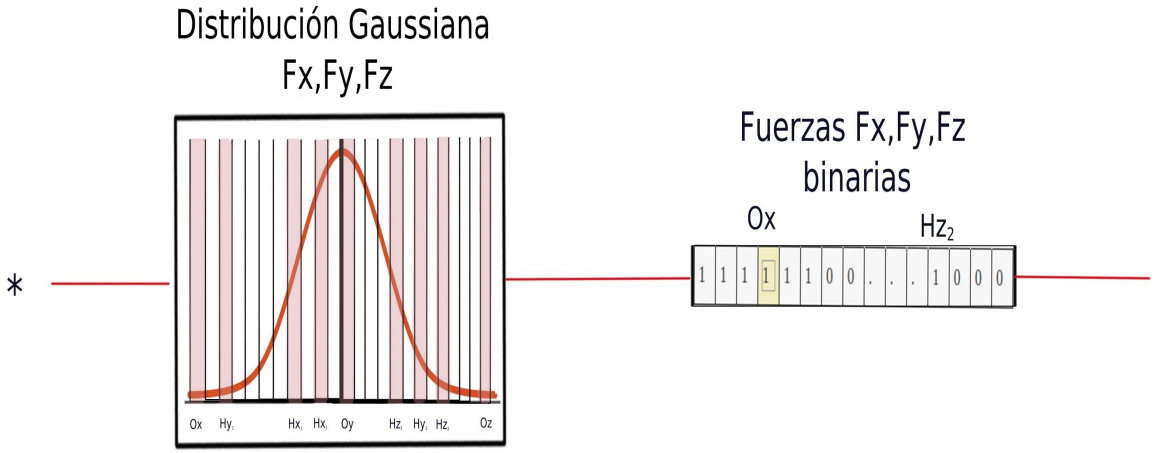
A manera de resumen, el diagrama de la figura 5.1.2 muestra el recorrido por el que pasaron los datos hasta llegar a este punto. En principio se realizó una separación de los datos en vecindarios de 100 moléculas de agua, luego a estos datos se les efectuó un recorrido al origen $0, 0, 0$. Después se llevó a cabo una rotación sobre los ejes x, y. El siguiente paso fue realizar una transformación de los ejes coordenados x, y, z a r, θ, ϕ. Esta conversión nos permitió separar los datos en componentes individuales, donde a las partes r, θ se les aplicó un filtro de suavizado. Ignorando los datos de ϕ, ya que, no se encontró ningún operador T que fuera favorable. Posteriormente, a todos los datos $r, theta, \phi$, se les aplicó un filtro de resalte de bordes. Estos datos filtrados son los usados como entradas en la RNA.

Figura 5.1.2: Recorrido de los datos



Antes de poder entrenar (* en la imagen 5.1.2) la RNA se implementó una conversión de las fuerzas reales (calculadas con la metodología clásica) en un sistema binario de posicionamiento. En la imagen 5.1.3, la gráfica en forma de gaussiana ilustra la distribución de nuestros datos. Las líneas representan las 4095 separaciones realizadas, mientras que las secciones marcadas de rojo corresponden al vector de fuerzas, como en el cuadro 4.3. Finalmente, se convierten estas fuerzas posicionales en un vector de posición binario.

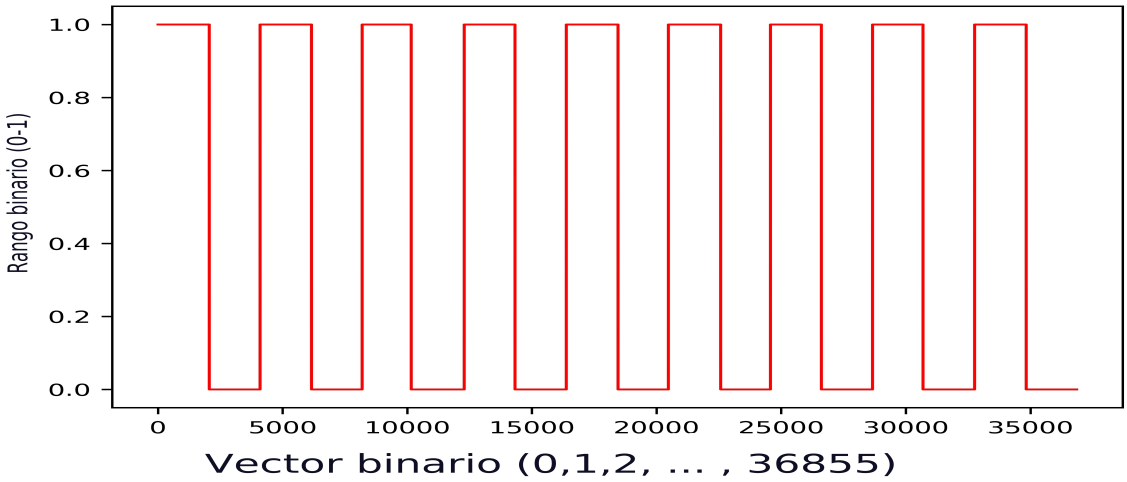
Figura 5.1.3: Recorrido de los datos de salida



5.2. Predicciones

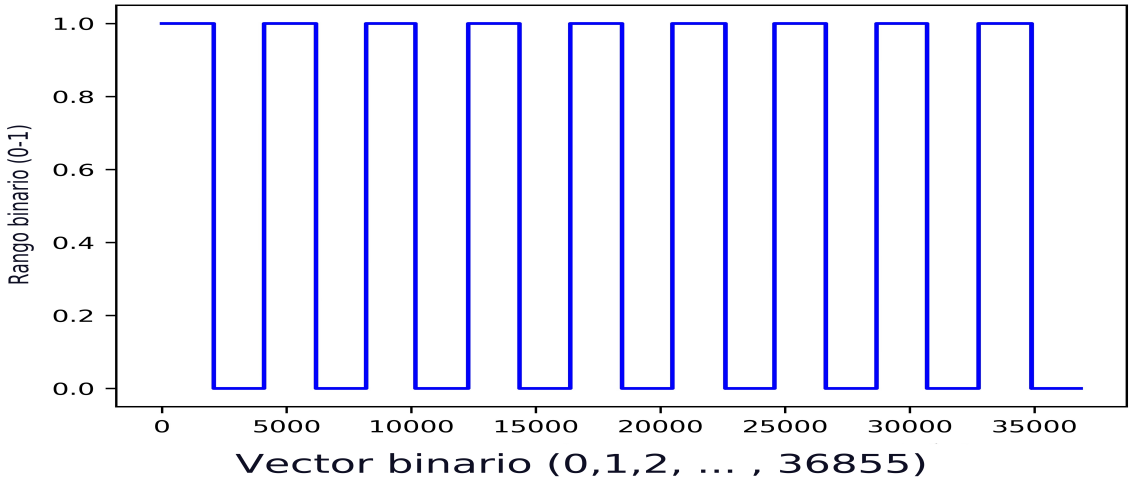
Una vez se entrenó el modelo anterior de RNA, se requiere verificar que el aprendizaje adquirido en el conjunto de neuronas sea el correcto. La predicción de la RNA debe efectuarse con datos fuera del conjunto de entrenamiento. Para ello se utilizó en principio el cuadro de tiempo $t = 11$, aplicando todo el preprocesamiento, visto hasta ahora (100 vecinos más cercanos, desplazamiento, rotación, etc.), para así obtener una entrada válida para la red neuronal de 900 datos por molécula de agua. De la misma forma, se realizó la conversión de las fuerzas resultantes (fuerzas del cálculo clásico) de este cuadro $t = 11$ al sistema de posicionamiento binario 4.4 de 36855 datos por molécula de agua. Tomando las fuerzas del cálculo clásico 5.4 de la primera agua 4.0.1 de este frame, en su forma de posicionamiento binario, obtenemos la siguiente gráfica 5.2.1.

Figura 5.2.1: Fuerzas obtenidas con cálculos clásicos y transformadas a un sistema de posicionamiento binario en un cuadro de tiempo $t = 11$.



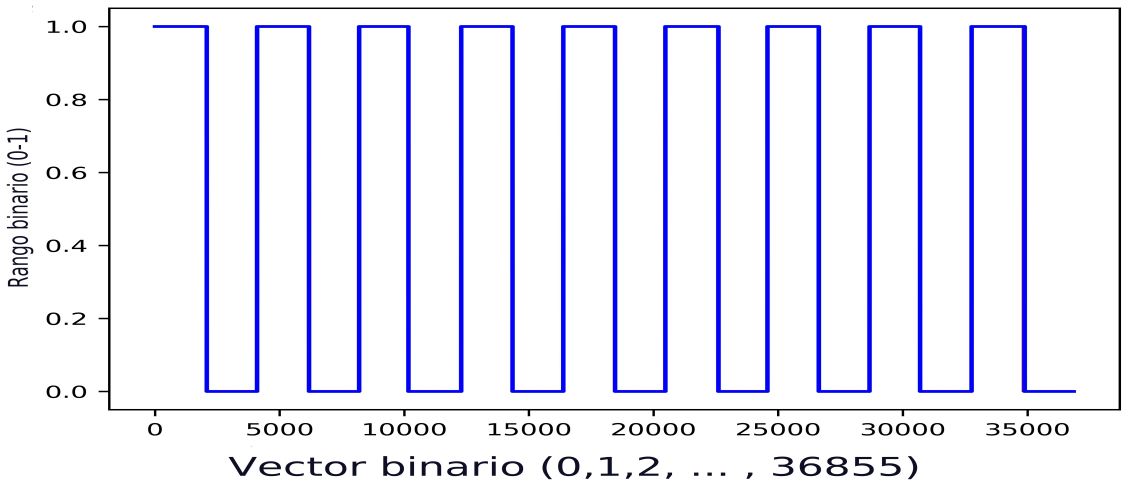
Si tomamos la primera molécula de agua de este frame $t = 11$ en su forma de imagen (resalte de bordes 4.3.2), haciéndola pasar por nuestra RNA, obtenemos una predicción de las fuerzas para esta molécula agua, dando como resultado la siguiente gráfica 5.2.2.

Figura 5.2.2: Fuerzas predichas con la RNA en su transformación de posicionamiento binario en un cuadro de tiempo $t = 11$.



Al contar con las fuerzas calculadas mediante el método clásico y las fuerzas predichas por la RNA, podemos combinar estas dos gráficas a manera de comparación. Esto nos permitirá observar de manera sencilla la precisión de las predicciones realizadas por esta RNA (ver gráfica 5.2.3).

Figura 5.2.3: Comparación de los datos predichos contra los datos calculados



Al no poder ver una diferencia entre la gráfica de fuerzas predicción y a la gráfica de las

fuerzas clásicas, nos encontramos ante una predicción que podríamos denominar perfecta, sin embargo, como aplicamos una conversión posicional binaria, ahora debemos aplicar la forma inversa este procedimiento para obtener, los datos reales (su forma decimal). El primer paso es transformar cada una de las tramas de unos y ceros en vectores numéricos, para lo cual solo es necesario contar el número de unos existentes dentro del vector en tramos de 4095 datos 5.2. El conteo de estos unos por tramos generará un nuevo vector de 9 elementos 5.3. Finalmente, para estos 9 números se obtienen los valores posicionales dentro de la Gaussiana 5.2.1. Un ejemplo de ello se muestra a continuación:

Cuadro 5.2: Vector de posicionamiento binario

$$\begin{bmatrix} 11..,00 & 11..,00 & 11..,00 & 11..,00 & 11..,00 & 11..,00 & 11..,00 & 11..,00 & 11..,00 \end{bmatrix}_{[1,36855]}$$

Pasamos de un vector de posiciones binarias, a un vector de enteros, los cuales representan el posicionamiento dentro de la Gaussiana.

Cuadro 5.3: Vector de posicionamiento con números enteros

$$\begin{bmatrix} 1125 & 1155 & 1135 & 1600 & 2620 & 2630 & 2200 & 1260 & 2175 \end{bmatrix}_{[1,9]}$$

Después se tomarán estos números posicionales para realizar el siguiente procedimiento:

$$\begin{aligned} &1125 \cdot 0{,}0004884 = 0{,}54945 \\ &\text{Dato decimal}{=}0{,}54945 - 1 = -0{,}45055 \end{aligned} \tag{5.2.1}$$

Donde el 0,0004884 corresponde a la separación del histograma de la sección 4.4, ecuación 4.4.2.

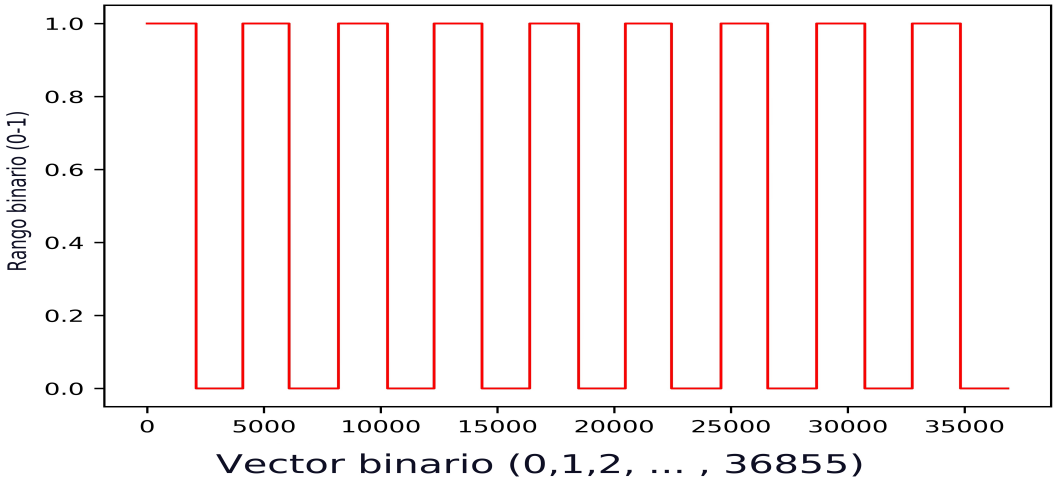
Cabe destacar que este resultado de la predicción, se ve afectado por la separación del histograma, así como del mismo error de la predicción de la RNA. La siguiente tabla 5.4 muestra los datos clásicos, así como los datos predichos en su forma decimal.

Cuadro 5.4: Fuerzas clásicas comparadas con las fuerzas predichas por la RNA

	Fuerzas clásicas	Fuerzas predichas
FO_x^0	0,005089264538	0,006667
FO_y^0	0,007895352043	0,018001
FO_z^0	−0,038309211518	0,017334
FH_{1x}^0	−0,005100089552	−0,004
FH_{1y}^0	0,013636783711	0,012667
FH_{1z}^0	0,024596679766	0,007334
FH_{2x}^0	−0,002122767949	0,004667
FH_{2y}^0	−0,010854328721	0,020001
FH_{2z}^0	0,010996639129	0,006667

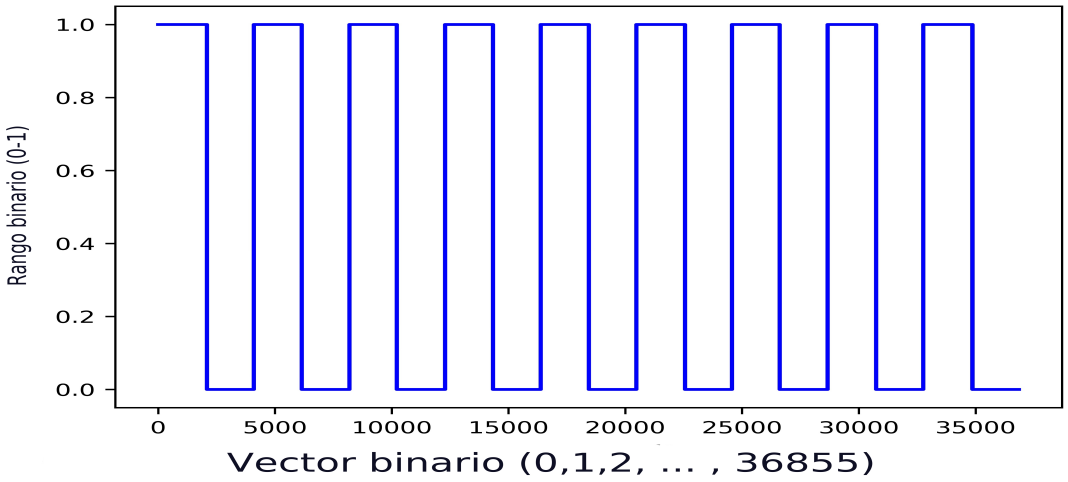
Debido a que los resultados obtenidos con la predicción anterior se obtuvieron buenos resultados en la mayoría de los casos, se decide emplear un conjunto de datos totalmente separado de los datos de entrenamiento. Realizando el mismo análisis a un frame con 100 espacios de tiempo respecto a los datos de entrenamiento, se obtuvo la siguiente gráfica con las fuerzas de la primera molécula de agua (ver gráfica 5.2.4).

Figura 5.2.4: Fuerzas obtenidas con cálculos clásicos y transformadas a un sistema de posicionamiento binario en un cuadro de tiempo $t = 100$



De igual forma, realizando la predicción de la primera agua de este frame se obtuvo la siguiente gráfica 5.2.5.

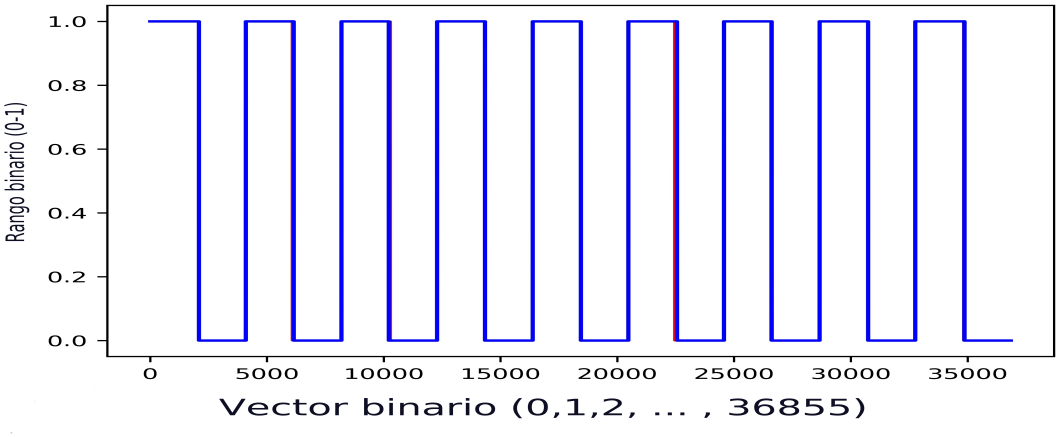
Figura 5.2.5: Fuerzas predichas con la RNA en su transformación de posicionamiento binario en un cuadro de tiempo $t = 100$



Nuevamente, veamos la unión de las dos gráficas anteriores para ver qué tanta diferencia

existe entre ambas. (Ver gráfica 5.2.6).

Figura 5.2.6: Comparación de los datos predichos contra los datos calculados



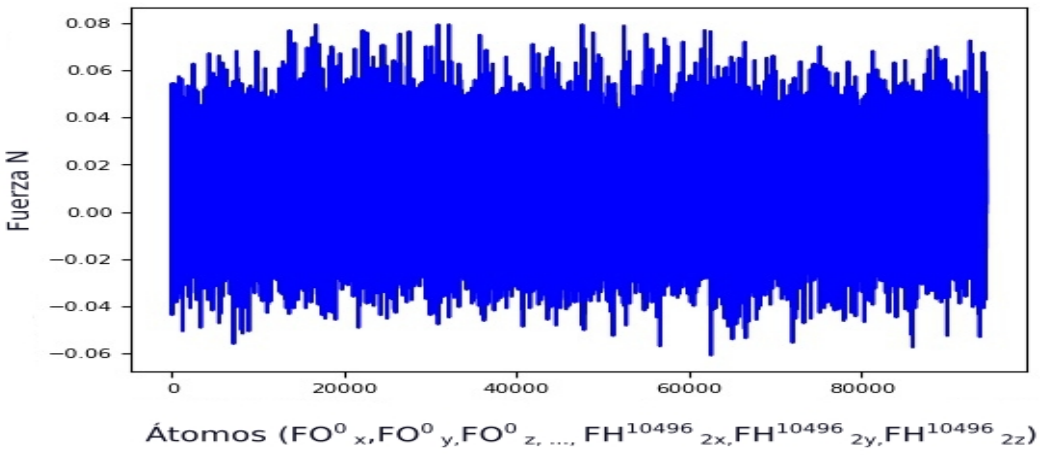
Aunque nuevamente se ve una predicción bastante acertada, como se demostró en el cuadro anterior 5.4, esto no quiere decir que la exactitud de los datos sea perfecta. Aun así, se siguió empleando este método para él 90 % de los datos de una simulación real, obteniendo resultados similares en cada una de las pruebas.

Capítulo 6

Resultados

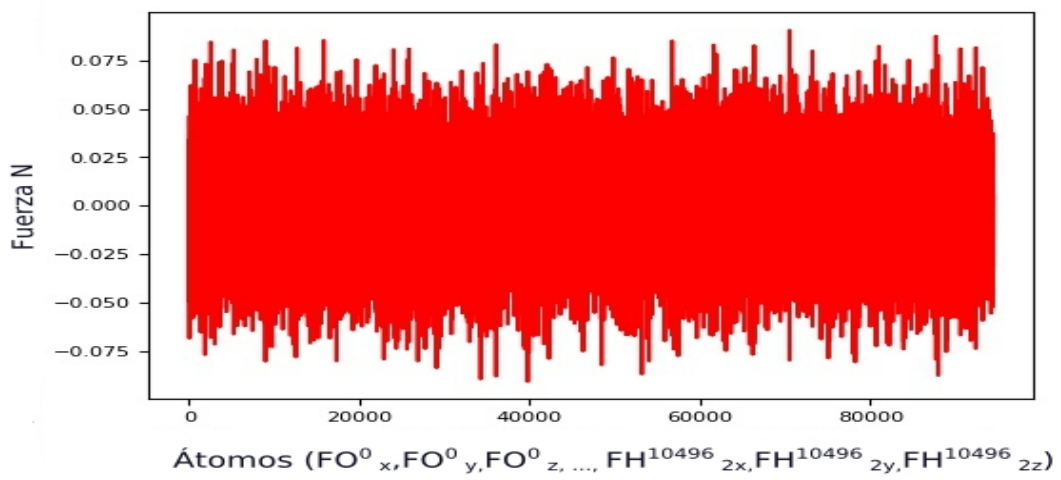
Continuar con el análisis anterior molécula por molécula de las 10496 disponibles, en un cuadro de tiempo, resultaría abrumador y repetitivo. Por ello, en este capítulo analizaremos un frame en su totalidad sin pasar por cada una de las aguas (todo un contenedor). Inicialmente, obtengamos las fuerzas de este frame completo, mediante cálculos clásicos. (ver grafica 6.0.1)

Figura 6.0.1: Distribución de las fuerzas obtenidas mediante cálculos clásicos en todo un cuadro de tiempo $t = 15$



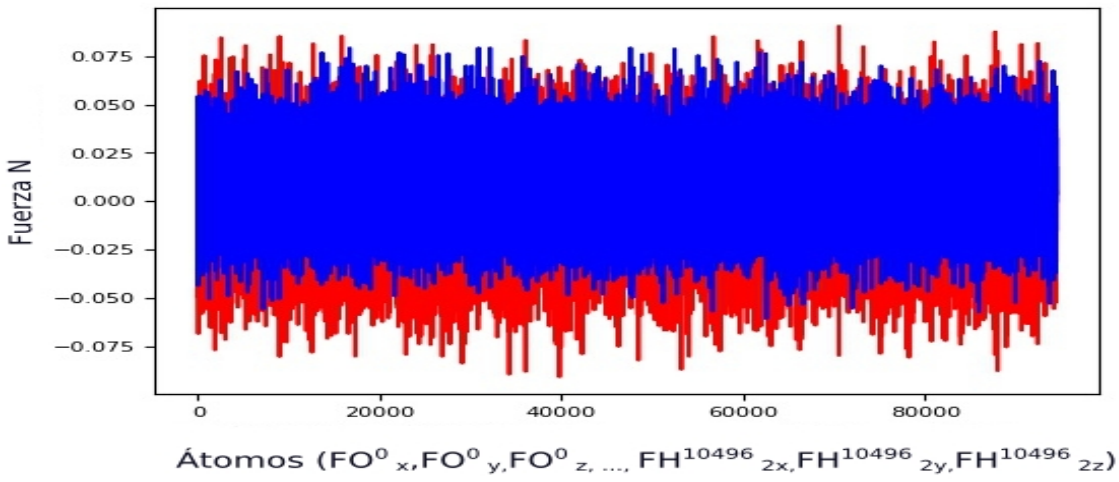
Luego, tomemos las posiciones x, y, z de todo este cuadro $t = 15$ para convertirlas en entradas efectivas para esta RNA. Una vez se generaron las predicciones con estas entradas, es posible realizar la forma inversa del posicionamiento binario para todo el frame. La siguiente gráfica 6.0.2, muestra las fuerzas predichas en su forma decimal.

Figura 6.0.2: Distribución de las fuerzas predichas por la RNA en todo un cuadro de tiempo $t = 15$



Una vez más, unamos las gráficas anteriores para comparar que tan diferentes son una de la otra. (Ver gráfica 6.0.3)

Figura 6.0.3: Comparación entre los datos predichos contra los datos calculados en el cuadro de tiempo $t = 15$



Está claro que, no existe una unión perfecta entre las dos gráficas anteriores, dando a entender que el error de la predicción, más el error de la transformación binaria, son lo suficientemente grandes como para no obtener buenos resultados. Si lo analizamos a fondo mediante el error cuadrático medio de este frame, mediante la fórmula 6.0.1, obtenemos un error de 0,0005907620854341286.

$$MSE = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y}_i)^2 \tag{6.0.1}$$

Ahora, si calculamos la desviación cuadrática media mediante la fórmula 6.0.2, obtenemos una desviación de 0,02430559782095739.

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y}_i)^2} \tag{6.0.2}$$

Estos datos nos dicen que la predicción que estamos obteniendo en efecto no es favorable, ya que un error de 0,024... para la escala de los datos promedio de la gaussiana, aún es muy grande, sin embargo, como lo denotan las gráficas, los datos predichos no pierden estructura manteniendo un rango que no supera los límites que van de $-1, 1$, lo cual nos dice que este es el camino correcto a seguir para un encontrar un modelo que obtenga una predicción mucho más precisa. Si analizamos los demás cuadros de tiempo, nos encontraremos con una situación muy similar, tanto en la distribución de los datos, como en la desviación cuadrática media. Por este motivo, no se colocó otro cuadro de tiempo.

Capítulo 7

Conclusiones

Al realizar este procedimiento similar al de una RNA convolucional podemos decir que la predicción alcanzada en la totalidad de los datos aunque carece de una precisión absoluta es lo suficientemente capaz de describir cualquier conjunto de fuerzas dentro de cualquier contenedor sometido a las mismas condiciones que las que se emplearon en esta tesis.

El error que obtenemos sobre los datos está dado por diferentes situaciones. La primera de ellas es debido al número de neuronas empleado, ya que, este es un número limitado por el hardware con el que contamos. Otra dificultad consta en la separación realizada en el histograma, al no ser exacta sobre todos los datos. Si bien, es posible corregir estas dificultades, ya sea que, se tenga un mejor equipo de cómputo, se aumente el número de neuronas empleado, se aumente la resolución de la separación del histograma o se cree un mejor modelo de RNA, no podemos asegurar que esto se disminuya el error.

Aunque el método empleado en esta tesis consume mucho tiempo en limpiar los datos de entrada, al igual que los de salida, aún podemos aseverar que supera al sistema de cálculo clásico, ya que toda esta metodología tiene un comportamiento puramente lineal. Para que exista un claro ganador entre el cálculo de las fuerzas de forma clásica y las predicciones de las fuerzas, primero se han de aumentar el número de moléculas de agua que a su vez aumentara el tamaño del contenedor, si bien esto no representa un gran cambio, también es posible generar un aumento en el número de cuadros de tiempo, de esta forma se fuerza a alcanzar un límite computacional y de tiempo, donde resultaría como vencedor este modelo de RNA.

Una ventaja más de esta RNA es la facilidad de compartir el modelo entrenado, para que este se ejecute en cualquier computadora que tenga la capacidad de ejecutar CUDA y con una memoria gráfica de acceso aleatorio VRAM (Video Random Access Memory) superior a los 8 gigabytes.

Capítulo 8

Apéndices

8.1. Programas realizados

8.1.1. Vecindario de 100 moléculas de agua código Python-Cuda

El siguiente código resuelve el problema visto en el capítulo 4. Aquí se implementan las fórmulas de las distancias respecto al oxígeno central y se guarda un vecindario de 100 moléculas de agua. Para ello se realiza una implementación mediante Python que utiliza el kernel de CUDA. La librería @cuda.jit se encarga de la comunicación de estos dos lenguajes de promoción. Al finalizar el procedimiento, el código genera un archivo que guarda cada vecindario encontrado.

[1]:
```
import numpy as np
from numba import cuda,jit,float32
import math
import os
```

[2]:
```
@cuda.jit
def cien_cercanos_kernel(ent, guardar):
    # Hilo en el que se ejecuta cuda
    hilo_actual= cuda.threadIdx.x + cuda.blockDim.x * cuda.blockIdx.x


    # Vector temporal para validar
    # si ya se encontro una distancia

    temporal = 10496
    val = cuda.local.array((temporal,), dtype=float32)
    for jj in range(temporal):
        val[jj] = 0.0                                    #/
```

```
hilo_temporal=hilo_actual
coordenada_xyz=hilo_temporal*9

# Número de datos 100 mas cercanos=100*9 cambia respecto a cada hilo
n_cantidad_datos=coordenada_xyz*100

# Dato x,y,z que se compara para obtener el más cercano
componente_x=ent[0][hilo_actual*9]
componente_y=ent[0][hilo_actual*9+1]
componente_z=ent[0][hilo_actual*9+2]

# Posicion del dato xyz encontrado
identificador=0;

for l in range(100):

    lim_superior=1000
    contador=0

    for m in range(0,94464,9):
    distancia=(ent[0][m]-componente_x)**2+(ent[0]

    [m+1]-componente_y)**2+(ent[0][m+2]-componente_z)**2

        # Calculo de la distancia respecto al atomo central
        distancia=math.sqrt(distancia)
        contador+=1
        if (distancia<= lim_superior and val[contador]==0.0):

            # Guardado de los datos temporales o -h -h cada uno
            # con 3 coordenada xyzal terminal el ciclo obtengo
            # el atomo mas cercano
            coordenadax=ent[0][m]
            coordenaday=ent[0][m+1]
            coordenadaz=ent[0][m+2]
            coordenadax1=ent[0][m+3]
            coordenaday1=ent[0][m+4]
            coordenadaz1=ent[0][m+5]
            coordenadax2=ent[0][m+6]
            coordenaday2=ent[0][m+7]
            coordenadaz2=ent[0][m+8]

            # Actualizando el límite superior
```

```
                lim_superior=distancia
                identificador=contador

        # Los datos se salvan en el vector de salida
        guardar[0][n_cantidad_datos]=coordenadax
        guardar[0][n_cantidad_datos+1]=coordenaday
        guardar[0][n_cantidad_datos+2]=coordenadaz
        guardar[0][n_cantidad_datos+3]=coordenadax1
        guardar[0][n_cantidad_datos+4]=coordenaday1
        guardar[0][n_cantidad_datos+5]=coordenadaz1
        guardar[0][n_cantidad_datos+6]=coordenadax2
        guardar[0][n_cantidad_datos+7]=coordenaday2
        guardar[0][n_cantidad_datos+8]=coordenadaz2

        # Suma 9 para guardar los otros o -h -h
        n_cantidad_datos+=9
        val[identificador]=1.0
```

[3]:
```
def cuda_gpu(X):

    # Envio de la informacion a la GPU
    gpu_cuda = cuda.to_device(X)

    # Generando el espacio de salida
    res = np.zeros(shape=(1,9446400), dtype=np.float32)

    # Envio de la informacion a la GPU (vector de resultados)
    gpu_cuda_res = cuda.to_device(res)

    # Número de bloques
    hilos_por_bloque = 128

    # Número de hilos
    bloques_por_malla = 82

    # Llamando al kernel
    cien_cercanos_kernel[bloques_por_malla, hilos_por_bloque](
    gpu_cuda, gpu_cuda_res)
```

```
    # Copia de los datos de la GPU a la CPU
    result = gpu_cuda_res.copy_to_host()
    return result
```

[4]:
```
movie='/home/pro/Documents/movie.xyz'                                  ␣
 ↪#lectura del movie xyz
```

[5]:
```
movied=open(movie, 'r')
dato=movied.read().split()

separador=4
contador=0
entrada_cuda=[]

# Lectura de los datos

for i in range(6297600):
    entrada_cuda.append([])
    for a in range(3):
        if contador == 94464:
            contador=0
            separador=separador+3
        entrada_cuda[i].append(dato[separador])
        separador+=1
        contador+=1
    separador=separador+1
```

[6]:
```
# Formando los cuadros de tiempo (frames) de cada movimiento de particulas
# En este caso solo 2 frames

ent_cuda=[]
cont=0
#0,2,9,19
for i in range (2):
    ent_cuda.append([])
    for j in range(31488):
        for k in range(3):
            ent_cuda[i].append(float(entrada_cuda[cont][k]))
        cont+=1
```

[7]:
```
resultado=[]
for i in range(2):
    ent1_cuda=np.asarray([ent_cuda[i]])
    #se envia freme por frame
```

```
    resultado.append(cuda_gpu(ent1_cuda))
```

[9]:
```
# Guardado de los datos en formato x y z en un achivo

h="h"
o="o"
file = open("salida_cuda.xyz", "w")
file.write("300" + os.linesep)
file.write("XYZ" + os.linesep)
cont=0
for i in range(2):
    for j in range(0,9446400,9):
        file.write(o+"   "+ str(resultado[i][0][j])+"  ,  " +
        str(resultado[i][0][j+1])+"  ,  "+
        str(resultado[i][0][j+2])+ os.linesep)
        file.write(h+"   "+ str(resultado[i][0][j+3])+"  ,  " +
        str(resultado[i][0][j+4])+"  ,  "+
        str(resultado[i][0][j+5])+ os.linesep)
        file.write(h+"   "+ str(resultado[i][0][j+6])+"  ,  " +
        str(resultado[i][0][j+7])+"  ,  "+
        str(resultado[i][0][j+8])+ os.linesep)
        cont+=1
        if cont==100:
            cont=0
            file.write("300" + os.linesep)
            file.write("XYZ" + os.linesep)
file.close()
```

8.1.2. Código en Fortran-CUDA-Multi-GPU

El siguiente programa utiliza un sistema de programación estructurada utilizando el lenguaje C, sin embargo, se le llama CUDA debido a que emplea métodos que solo se pueden emplear en este lenguaje. La parte de Fortran solo se utilizó para enviar los datos posicionales del agua, así como guardar los vecindarios después del cálculo en paralelo. Recordar que este código utilizará todas las GPU disponibles.

[ ]:
```
// ********************
// Obteniendo 0-99 vecinos por cada átomo
// de un conjunto de N átomos
// ********************


# include <stdio.h>
# include <math.h>
```

```
# include <assert.h>
# include <iostream>
# include <cuda_runtime.h>


typedef struct

  {int Ndatos;
   int DatosInicio, DatosFin;           // inicio & fin de los datos
   float *Datos_L, *Datos_D;            // local & dispositivo de entrada
   double *resultados_L, *resultados_D; // local & dispositivo de salida
  } TGPUarray;

   const int num_GPU_max= 32;      // maximo número de GPUs


// **********************
// Modulo en paralelo
// **********************
    __global__ static void
    reduceKernel (float *xx,
                  double *resultados,
                  float datos_inicio,
                  float datos_fin,
                  int nAtoms,
                  int vecinos)


  {const int indice= blockIdx.x * blockDim.x + threadIdx.x;

  // Esta condición puede ser comentada y se regresará a la versión
  // simple de CUDA con una sola GPU

  if(datos_inicio <= indice && indice <= datos_fin){

  // Número de atomos

  const int atomos= 10496;

  // Vector temporal validador con ceros

  float val[atoms];

  for (int jj= 0; jj <= atoms; jj++) {val[jj]= 0.0;}
```

```
  double dist;              // Variable de distancia
  double LimSup;            // limite inicial
  double indentificador;    // identificador del_ Átomo

  int cont= 0.0;             // contador
  int nAtCoords= 9*nAtoms;   // numero de atomos por coordenada
  int salto= 9*indice*vecinos; // tamaño de los saltos

// coordenadas por átomo con indice

  float ax= xx[indice*9+0];
  float ay= xx[indice*9+1];
  float az= xx[indice*9+2];

 float coordenadax;
 float coordenaday;
 float coordenadaz;
 float coordenadax1;
 float coordenaday1;
 float coordenadaz1;
 float coordenadax2;
 float coordenaday2;
 float coordenadaz2;


  for (int ll=0; ll < vecinos; ll++)   //****
                                       //
// inicializando el limite superior    //
  {LimSup= 1000.0;                     //
                                       //
// inicializando el contador           //
   cont=0;                             //
                                       //
// find vecinos 'll' of atom 'indice'     // ----
                                          //
  for (int mm=0; mm < nAtCoords; mm= mm+9)   //
                                          //
 {dist= powf ((xx[mm+0]-aa),2) +          //
        powf ((xx[mm+1]-bb),2) +          //
        powf ((xx[mm+2]-cc),2);           //
                                          //
```

```
 dist= sqrtf(dist);                                  //
 cont++;                                             //
                                                     //
 if (dist <= max && val[cont]== 0.0)                 //
    {indentificador= cont; LimSup= dist;             //
                                                     //
     coordenadax=xx[0][m+0]                          //
     coordenaday=xx[0][m+1]                          //
     coordenadaz=xx[0][m+2]                          //
     coordenadax1=xx[0][m+3]                         //
     coordenaday1=xx[0][m+4]                         //
     coordenadaz1=xx[0][m+5]                         //
     coordenadax2=xx[0][m+6]                         //
     coordenaday2=xx[0][m+7]                         //
     coordenadaz2=xx[0][m+8]                         //
                                          }          //
   }                                        // ----                    ␣
↪ // --------
                                        //
// guardando y actulizando limites     //
  resultados_D[salto+0]= coordenadax; //
  resultados_D[salto+1]= coordenaday; //
  resultados_D[salto+2]= coordenadaz; //
  resultados_D[salto+3]= coordenadax1;//
  resultados_D[salto+4]= coordenaday1;//
  resultados_D[salto+5]= coordenadaz1;//
  resultados_D[salto+6]= coordenadax2;//
  resultados_D[salto+7]= coordenaday2;//
  resultados_D[salto+8]= coordenadaz2;//
                                        //
  salto= salto + 9;                     //
  val[identificador]=1.0;               //
                                        //
  }                                     //****
}       // cierre de condición if
}       // cierre de kernel



 extern "C" void

  kernel_ia_(int *nPar, int *Vecinos, int *Mdata,
             float *coords, double *buf, int *Division)
```

```
  {

// Programacion estructurada con el arreglo TGPUarray

   TGPUarray array[num_GPU_max];

// Datos para la programacion en paralelo

   int nAtoms= *nPar;         // número de átomos
   int vecinos= *Vecinos;     // Átomo central + 99 vecinos
   int nDatos= *Mdata;        // 3*Natoms*100
   int i, j, nGPUs;           //
   int datoms= *Division;     // Division para los nAtoms
   int nBlocks= 128  ;        // número de bloques
   int nThreads= 82;         // número de hilos por bloque

// Número de disponible GPU
   cudaGetDeviceCount(&nGPUs);

// Número de datos por GPU
   int nDatosPorGPU= nDatos/nGPUs;


   int primero= 0, fin= nDatosPorGPU-1;

// número de átomos por GPU

   for (i= 0; i < nGPUs; i++)

  {array[i].Ndatos= nDatosPorGPU;}


   for (i=0; i < nGPUs; i++)

// limites por GPU

  {array[i].DatosInicio= primero/datoms;
   array[i].DatosFin= fin/datoms;

   printf (" %d:   %d  %d\n",
             i+1, primero, fin);

   primero= fin + 1;
   fin=   fin + nDatosPorGPU;
```

```
 }



 for (i= 0; i < nGPUs; i++)

{cudaSetDevice(i);

 cudaMalloc ((void **) &array[i].Datos_D,    nDatos*sizeof(float));
 cudaMalloc ((void **) &array[i].resultados_D, nDatos*sizeof(double));

 cudaMallocHost ((void **) &array[i].Datos_L,    nDatos*sizeof(float));
 cudaMallocHost ((void **) &array[i].resultados_L,␣
↪nDatos*sizeof(double));

 for (int ij= 0; ij < nDatos; ij++)

{array[i].Datos_L[ij]= coords[ij];}

}


 for (i= 0; i < nGPUs; i++)

{cudaSetDevice(i);

 cudaMemcpyAsync (array[i].Datos_D,
                  array[i].Datos_L,
                    nDatos*sizeof(float),
                    cudaMemcpyHostToDevice);

 reduceKernel <<< nBlocks, nThreads, 0 >>>
                                        (array[i].Datos_D,
                                         array[i].resultados_D,
                                         array[i].DatosInicio,
                                         array[i].DatosFin,
                                          nAtoms,
                                          vecinos);


 cudaMemcpyAsync (array[i].resultados_L,
                  array[i].resultados_D,
                    nDatos*sizeof(double),
                    cudaMemcpyDeviceToHost);
```

```
}


int knt1= 0, knt2= 0;


for (i= 0; i < nGPUs; i++)

{cudaSetDevice(i);

for (j= knt2; j < array[i].Ndatos + knt2; j++)
{buf[knt1]= array[i].resultados_L[j];
 knt1 +=1;}

 knt2= knt1;
}


 for (i= 0; i < nGPUs; i++)

{cudaSetDevice(i);


 cudaFreeHost (array[i].Datos_L);
 cudaFree     (array[i].Datos_D);

 cudaFreeHost (array[i].resultados_L);
 cudaFree     (array[i].resultados_D);

 cudaDeviceReset();
}


}
```

8.1.3. Desplazamiento al origen, rotación sobre los ejes y,z y conversión del plano x,y,z al r,theta,fhi

Aplicando las fórmulas vistas en el capítulo 4.1, se desarrolló el siguiente código que obtiene el desplazamiento al origen de cada vecindario. Después crea una rotación sobre los ejes x,y. Finalmente, realiza un cambio de coordenadas x, y, z a $r, theta, fhi$. Destacar que se toma en cuenta en que cuadrante se encuentra cada coordenada x, y, z para poder así aplicar el procedimiento adecuado.

[1]:
```
# Leer datos

Datos_cuda='salida_cuda.xyz
tem=open(Datos_cuda, 'r')

# Separacion del archivo

datos=tem.read().split()
separador=3
contador=0

# Vector del vecindario

datos_100=[]

frames=10496*15

for i in range(frames):
    datos_100.append([])
    for j in range(300*3):
        datos_100[i].append(datos[separador])
        separador=separador+2
    separador=separador+2
```

[2]:
```
# Desplazamiento al origen 0,0,0

desplazamiento=[]
for i in range(frames):
    desplazamiento.append([])
    xcentral=float(datos_100[i][0])
    ycentral=float(datos_100[i][1])
    zcentral=float(datos_100[i][2])
    for j in range(0,len(datos_100[i]),3):
        desplazamiento[i].append(float(datos_100[i][j])-xcentral)
        desplazamiento[i].append(float(datos_100[i][j+1])-ycentral)
        desplazamiento[i].append(float(datos_100[i][j+2])-zcentral)
```

[3]:
```
# Rotación sobre los ejes coordenados y,z

import math
```

```
datos2_100=[]
datos3_100=[]
datos4_100=[]
for i in range(frames):
    datos2_100.append([])
    datos3_100.append([])
    datos4_100.append([])

    x1=float(desplazamiento[i][3])
    y1=float(desplazamiento[i][4])

    if (x1==0):
        tetaz=3.0*(math.pi/2)
    else:
        v1=math.atan(abs(y1/x1))
        if(x1>0.0 and y1==0.0):
            tetaz=0

        if(x1>0.0 and y1>0.0):
            tetaz=v1

        if(x1==0.0 and y1>0.0):
            tetaz=math.pi/2

        if(x1<0.0 and y1>0.0):
            tetaz=math.pi-v1

        if(x1<0.0 and y1==0.0):
            tetaz=math.pi

        if(x1<0.0 and y1<0.0):
            tetaz=math.pi+v1

        if(x1==0.0 and y1<0.0):
            tetaz=3.0*(math.pi/2)

        if(x1>0.0 and y1<0.0):
            tetaz=2.0*math.pi-v1


    for j in range(0,len(desplazamiento[i]),3):
        x=float(desplazamiento[i][j])
        y=float(desplazamiento[i][j+1])
        z=float(desplazamiento[i][j+2])
```

```
        datos2_100[i].append(x*math.cos(tetaz) + y*math.sin(tetaz))
        datos2_100[i].append(-x*math.sin(tetaz) + y*math.cos(tetaz))
        datos2_100[i].append(z)


    x2=float(datos2_100[i][3])
    z2=float(datos2_100[i][5])
    v1=math.atan(abs(z2/x2))

    if(x2>0.0 and z2==0.0):
        tetay=0

    if(x2>0.0 and z2>0.0):
        tetay=v1

    if(x2==0.0 and z2>0.0):
        tetay=math.pi/2.0

    if(x2<0.0 and z2>0.0):
        tetay=math.pi-v1

    if(x2<0.0 and z2==0.0):
        tetay=math.pi

    if(x2<0.0 and z2<0.0):
        tetay=math.pi+v1

    if(x2==0.0 and z2<0.0):
        tetay=3.0*(math.pi/2)

    if(x2>0.0 and z2<0.0):
        tetay=2.0*math.pi-v1


    for j in range(0,len(datos2_100[i]),3):
        x=float(datos2_100[i][j])
        y=float(datos2_100[i][j+1])
        z=float(datos2_100[i][j+2])

        datos3_100[i].append(x*math.cos(tetay) + z*math.sin(tetay))
        datos3_100[i].append(y)
        datos3_100[i].append(-x*math.sin(tetay) + z*math.cos(tetay))

    if(datos3_100[i][3]<0.0):
```

```
        for j in range(0,len(datos3_100[i]),3):
            x=float(datos3_100[i][j])
            y=float(datos3_100[i][j+1])
            z=float(datos3_100[i][j+2])

            datos3_100[i][j]=x*math.cos(math.pi) + y*math.sin(math.pi)
            datos3_100[i][j+1]=-x*math.sin(math.pi) + y*math.cos(math.pi)
            datos3_100[i][j+2]=z

    y11=float(datos3_100[i][7])
    z11=float(datos3_100[i][8])
    v1=math.atan(abs(z11/y11))

    if(y11>0.0 and z11==0.0):
        tetax=0

    if(y11>0.0 and z11>0.0):
        tetax=v1

    if(y11==0.0 and z11>0.0):
        tetax=math.pi/2

    if(y11<0.0 and z11>0.0):
        tetax=math.pi-v1

    if(y11<0.0 and z11==0.0):
        tetax=math.pi

    if(y11<0.0 and z11<0.0):
        tetax=math.pi+v1

    if(y11==0.0 and z11<0.0):
        tetax=3.0*(math.pi/2)

    if(y11>0.0 and z11<0.0):
        tetax=2.0*math.pi-v1


    for j in range(0,len(datos3_100[i]),3):
        x=float(datos3_100[i][j])
        y=float(datos3_100[i][j+1])
        z=float(datos3_100[i][j+2])

        datos4_100[i].append(x)
```

```
        datos4_100[i].append(y*math.cos(tetax) + z*math.sin(tetax))
        datos4_100[i].append(-y*math.sin(tetax) + z*math.cos(tetax))

    if(datos4_100[i][7]<0.0):
        for j in range(0,len(datos3_100[i]),3):
            x=float(datos4_100[i][j])
            y=float(datos4_100[i][j+1])
            z=float(datos4_100[i][j+2])

            datos4_100[i][j]= x
            datos4_100[i][j+1]=y*math.cos(math.pi) + z*math.sin(math.pi)
            datos4_100[i][j+2]=-y*math.sin(math.pi) + z*math.cos(math.pi)
```

[4]:
```
# Método de comprovación

def convertidor(theta, phi,r):
    x = r*math.cos(phi) * math.sin(theta)
    y = r*math.sin(phi) * math.sin(theta)
    z = r*math.cos(theta)
    return x, y, z
```

[5]:
```
#transformacion de x,y,z a r,theta,phi

datarthetafhi=[]
for i in range(frames):
    datarthetafhi.append([])
    for j in range(0,900,3):
        if (j<2):
            datarthetafhi[i].append(0.0)
            datarthetafhi[i].append(0.0)
            datarthetafhi[i].append(0.0)

        else:
            a=round(datos4_100[i][j],6)
            b=round(datos4_100[i][j+1],6)
            c=round(datos4_100[i][j+2],6)
            temp_r=math.sqrt(a**2 + b**2 + c**2)
            r=temp_r

            phi=math.atan2(b, a)

            theta= math.atan2(math.sqrt(a**2 + b**2),c)
```

```
            phi=round(phi,6)
            theta=round(theta,6)

            datarthetafhi[i].append(r)
            datarthetafhi[i].append(theta)
            datarthetafhi[i].append(phi)
```

[6]:
```
h="h"
o="o"
import os
#se guarda los datos en formato x y z
file = open("angulos.rtf", "w")
file.write("300" + os.linesep)                    #O, H, H
file.write("molec" + os.linesep)
file.write("------------" + os.linesep)
cont=0

for i in range(frames):
    for j in range(0,900,9):
        file.write(o+"   "+ str(round(datarthetafhi[i][j],3))
        +"  ,  " +str(round(datarthetafhi[i][j+1],3))+"  ,  "+ str(round(
        datarthetafhi[i][j+2],3))+ os.linesep)
        file.write(h+"   "+ str(round(datarthetafhi[i][j+3],3)) +"  ,  "
        +str(round(datarthetafhi[i][j+4],3))+
        "  ,  "+ str(round(datarthetafhi[i][j+5],3))+ os.linesep)
        file.write(h+"   "+ str(round(datarthetafhi[i][j+6],3
        )) +"  ,  " +str(round(datarthetafhi[i][j+7],3))+"  ,  "+
        str(round(datarthetafhi[i][j+8],3))+ os.linesep)
    file.write("300" + os.linesep)
    file.write("molec" + os.linesep)
    file.write("------------" + os.linesep)

file.close()
```

8.1.4. Conversión de las fuerzas C, LJ a un vector posicional binario

Mediante la segmentación de la distribución Gaussiana de las fuerzas, se obtiene una posición. Esta genera un vector de 4095 posiciones por cada coordenada. El llenado de este vector depende de la posición. Si se encuentra en la posición 2000, entonces existirán 2000 unos y 2095 ceros dentro del vector que lo conforma.

El siguiente código implementa lo anterior guardado los vectores posicionales en conjuntos de 4095*9=36855 que son los que conforman una molécula de agua.

[1]:
```
# Libreria para la manipulación de vectores
import numpy as np

# Lectura del archivo
Datos_fuerzas='fuerzas-totales'
tem=open(Datos_fuerzas, 'r')
datos=tem.read().split()
```

[2]:
```
# Separación por renglón y acomodo de las fuerzas C + LJ

separador=3
contador=0
datos_fuerzas=[]

frames=1

for i in range(frames):
    datos_fuerzas.append([])
    for j in range(0,31488*3,3):
        datos_fuerzas[i].append(float(datos[separador]))
        datos_fuerzas[i].append(float(datos[separador+1]))
        datos_fuerzas[i].append(float(datos[separador+2]))
        separador=separador+4
    separador=separador+2

# Liberación de memoria
# limpieza de la variable datos
del datos
```

[3]:
```
# Función que convierte un número decimal
# en un vector de unos y ceros
# decimal=21 -> 21 unos y 4074 ceros

def binario_poscicional(decimal):
    activador=0
    binario=[]
    for i in range(4095):
        if(i<decimal):
            activador=1
        else:
            activador=0
        binario.append(activador)
    return binario
```

[4]:
```
# Procedimiento para averiguar la posición
# de la fuerza respecto a la gaussina en
# un rango de -1 a 1

incremento=0.0004884
vector_posicion=[]
for i in range(frames):
    vector_posicion.append([])
    for j in range(len(datos_fuerzas[i])):
        contador_posicion=0
        limite_inferior=-1
        for k in range(4095):
            limite_superior=limite_inferior+incremento
            if limite_inferior<=datos_fuerzas[i][j] and␣
 ↪datos_fuerzas[i][j]<=limite_superior:
                decimal=binario_poscicional(contador_posicion)
                vector_posicion[i].append(decimal)
                break;
            limite_inferior=limite_superior
            contador_posicion+=1
```

[5]:
```
# limpieza de la variable datos

del datos_fuerzas
```

[6]:
```
# Acomodo de los datos, 4095 elementos por coordenada
# 4095 en x, 4095 en y, 4095 en z

salida_red=[]
for i in range(frames):
    salida_red.append([])
    for j in range(len(vector_posicion[i])):
        salida_red[i].extend(vector_posicion[i][j])
```

[7]:
```
# Guardado de los frames de 9 posiciones
# 4095 * 9 = 36855

import os
file = open("rangos.tf", "w")
for i in range(frames):
    for j in range(0,len(salida_red[i]),36855):
```

```
        for k in range(36855):
            file.write(str(salida_red[i][k+j]))
        file.write(os.linesep)
```

8.1.5. Entrenamiento de la red neuronal keras-tensorflow

El siguiente procedimiento convierte un vector de tamaño n en una imagen de n*m. Después suaviza la imagen mediante un kernel y aplica un filtro llamado resalte de bordes. Estas imágenes creadas actuarán como entradas para la red neuronal. También este programa lee las fuerzas transformadas en unos y ceros. Estas fuerzas actúan como respuesta de salida a la red neuronal. Finalmente, se entrena el modelo de Keras-Tensorflow así como se guarda el modelo, la tasa de aprendizaje y las épocas.

[1]:
```
# Libreria para manejo de vectores

import numpy as np

# Librerias necesarias para la aplicación
# de los filtro

# Restaura la imagen

from skimage import restoration

# Realiza una convolucion con el filtro

from scipy.signal import convolve2d

# Filtro que contiene el resalte de bordes

from skimage import feature

# Algoritmo de revoltura

import random
```

[2]:
```
#lectura del archivo de angulos

ruta='angulos.rtf'
```

[3]:
```
abrir_archivo=open(ruta, 'r')

# separar datos por renglon
```

```
dato=abrir_archivo.read().split()

separador=4
coordenadas_xyz=[]

# número de frames a entrenar

frames=10496*10

for i in range(frames):
    coordenadas_xyz.append([])
    for j in range(300*3):
        coordenadas_xyz[i].append(float(dato[separador]))
        separador=separador+2
    separador=separador+3
```

[4]:
```
# Separación de los datos en vectores r,theta,fhi

r=[]
t=[]
f=[]

for i in range(frames):
    r.append([])
    t.append([])
    f.append([])
    for j in range(0,900,3):
        r[i].append(coordenadas_xyz[i][j])
        t[i].append(coordenadas_xyz[i][j+1])
        f[i].append(coordenadas_xyz[i][j+2])
```

[5]:
```
# Conversión de los vectores r,theta,fhi en matrices
# en un formato lo mas cuadrado posible

vector_imagen_r=[]
vector_imagen_t=[]
vector_imagen_f=[]

r= np.array(r, "float32")
t= np.array(t, "float32")
f= np.array(f, "float32")
for i in range(frames):
    vector_imagen_r.append(np.asarray(r[i]).reshape(15,20))
```

```
    vector_imagen_t.append(np.asarray(t[i]).reshape(15,20))
    vector_imagen_f.append(np.asarray(f[i]).reshape(15,20))
```

[6]:
```
#función para convertir true a 1 y false a 0

def convertir (vector):
    vector=vector.reshape(1,300)
    vector1=[]
    for i in range(300):
        if vector[0][i] == False:
            vector1.append(0)
        if vector[0][i] == True:
            vector1.append(1)
    return vector1
```

[7]:
```
# Kernel normal para r

filtror = np.ones((4,4)) / 15

# Kernel normal para theta

filtrot = np.ones((5,5)) / 13

entrada_red=[]

temporal=[]
for i in range(frames):

    # Convolucion entre la imagen y el kernel

    img = convolve2d(vector_imagen_r[i], filtror, 'same')

    # Aplicación del filtro resalte de bordes en r

    edger = feature.canny(img)

    # Convolucion entre la imagen y el kernel

    img = convolve2d(vector_imagen_t[i], filtrot, 'same')

    # Aplicación del filtro resalte de bordes en theta

    edget = feature.canny(img)
```

```
    # Aplicación del filtro resalte de bordes en fhi

    edgef = feature.canny(vector_imagen_f[i])


    # se aplica la funcion convertir

    vector_unos_r=convertir(edger)

    vector_unos_t=convertir(edget)

    vector_unos_f=convertir(edgef)

    vector_unos_r=np.asarray(vector_unos_r)
    vector_unos_t=np.asarray(vector_unos_t)
    vector_unos_f=np.asarray(vector_unos_f)

    temporal=[]
    temporal.extend(vector_unos_r)
    temporal.extend(vector_unos_t)
    temporal.extend(vector_unos_f)

    # se transforma de matriz a vector
    entrada_red.append(temporal)
```

[8]:
```
# Lectura del impuso de respuesta

salidas='rangos.tf'
```

[9]:
```
# abrir y leer el archivo
salida=open(salidas, 'r')

# separar por renglon las fuerzas
salida1=salida.read().split()

separador=0

# definir vector salida que contendra una matriz
salidas_red=[]
contador=0

for i in range(frames):
# transformar el vector sal en matriz
    salidas_red.append([])
```

```
    for a in range(1):
# guardar las fuerzas
        x = [int(a) for a in str(salida1[separador])]
        salidas_red[i].extend(x)
# satar un renglon
        separador+=1
```

[10]:
```
# Guardado de las posiciones vectoriales

x = range(frames)
ran=list(x)
```

[11]:
```
# Desordenamiento de las posiciones vectoriales

random.shuffle(ran)
```

[12]:
```
# Guardado de datos revueltos

entrada_red_random=[]
salidas_red_random=[]
for i in range(frames):
    entrada_red_random.append(entrada_red[ran[i]])
    salidas_red_random.append(salidas_red[ran[i]])
```

[13]:
```
# Conversión de los datos a flotantes

ent= np.array(entrada_red_random, "float32")
sal= np.array(salidas_red_random, "float32")
```

[14]:
```
# Libreria de tensorflow
import tensorflow.compat.v1 as tf

# Aditamento para seleccionar el gpu
import os
os.environ ['CUDA_VISIBLE_DEVICES'] = '0'
config = tf.ConfigProto()
config.gpu_options.allow_growth = True
sess = tf.Session (config = config)
```

[15]:
```
# Librerias necesarias para la red neuronal

from keras.models import Sequential
```

```
from keras.layers import Dense
from tensorflow import keras
import tensorflow as tf
from keras import models
from keras import layers
```

[16]:
```
# Definición del modelo de la red neuronal

model = models.Sequential()
model.add(layers.Dense(900, activation='tanh', input_shape=(900,)))
model.add(layers.Dense(4000, activation='tanh'))
model.add(layers.Dense(5500, activation='tanh'))
model.add(layers.Dense(3200, activation='tanh'))
model.add(layers.Dense(2000, activation='sigmoid'))
model.add(layers.Dense(1950, activation='tanh'))
model.add(layers.Dense(900, activation='tanh'))
model.add(layers.Dense(36855, activation='tanh'))
```

[17]:
```
from keras import losses
from keras import metrics
from tensorflow.keras import optimizers

model.compile(optimizer=optimizers.RMSprop(learning_rate=0.00001),
              loss=losses.binary_crossentropy,
              metrics=[metrics.binary_accuracy])
```

[18]:
```
# Guardado de las epocas y de los pesos.

from datetime import datetime
from tensorflow import keras
logdir="logs/fit/" + datetime.now().strftime("%Y%m%d-%H%M%S")
tensorboard_callback = keras.callbacks.TensorBoard(log_dir=logdir)
```

[19]:
```
# Se entrena el modelo y se define el tamaño de procesamiento

model.fit(ent,sal,epochs=10000,batch_size
=2048,callbacks=[tensorboard_callback])
```

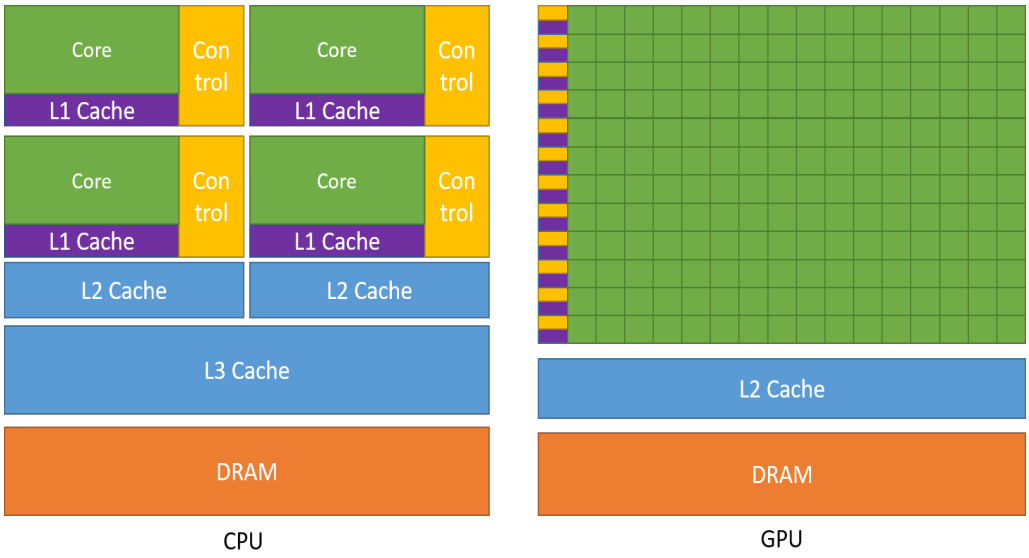
[20]:
```
# Se salva el modelo

model.save('modelrtf.h5')
```

8.2. CUDA(Compute Unified DeviceArchitecture)

Para poder implementar cualquier código con este lenguaje, primero es necesario tener un hardware de tipo GPU. Este tipo de dispositivos realiza cálculos de propósito general de forma paralela, rápida y con mayor capacidad que una CPU. Las GPU compatibles con CUDA deben contar con unidades de ejecución multiprocesadores de transmisión(SM), que se conectan entre sí mediante una memoria caché. Cada SM está compuesto por núcleos denominados transmisión de procesos(SP) o núcleos CUDA (NVIDIA Corporation & affiliates, 2023 [7]).

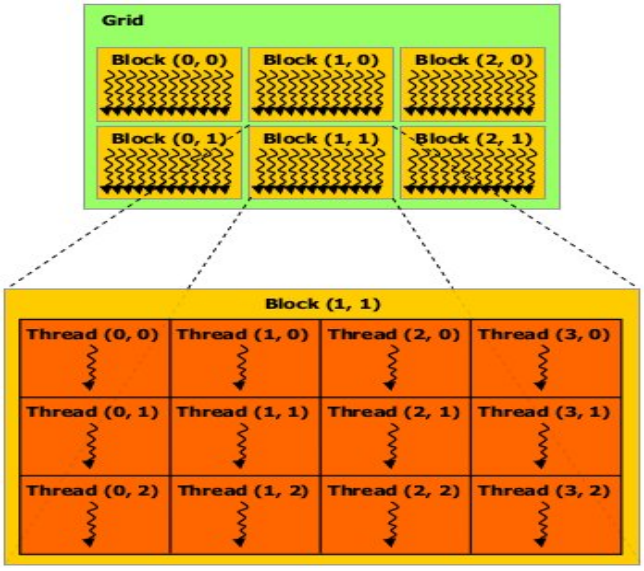
CUDA es el lenguaje de alto rendimiento que controla el hardware de una GPU facilitando el control de los componentes para un mejor aprovechamiento de los recursos del sistema. Sin embargo, antes de programar cualquier rutina es necesario conocer los componentes de nuestra GPU. 8.2.1

Figura 8.2.1: Diferencia entre una CPU / GPU



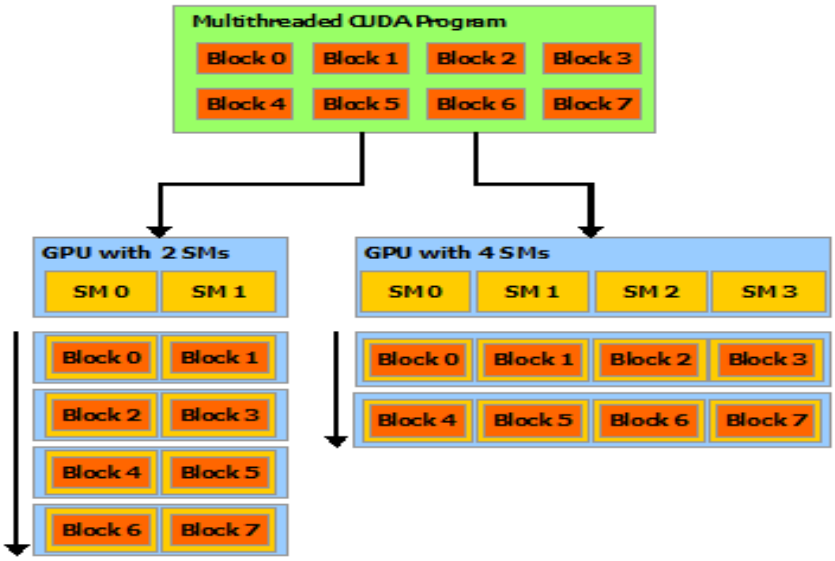
Cada procesador de una GPU representado en verde en la imagen anterior está compuesto de una serie de hilos de procesamiento, los cuales tienen la capacidad de ejecutar una función también llamada núcleo. A fin de aumentar la capacidad de procesamiento, es posible agrupar estos procesadores en una serie de bloques y estos a su vez en una cuadrícula.

Figura 8.2.2: Cuadricula



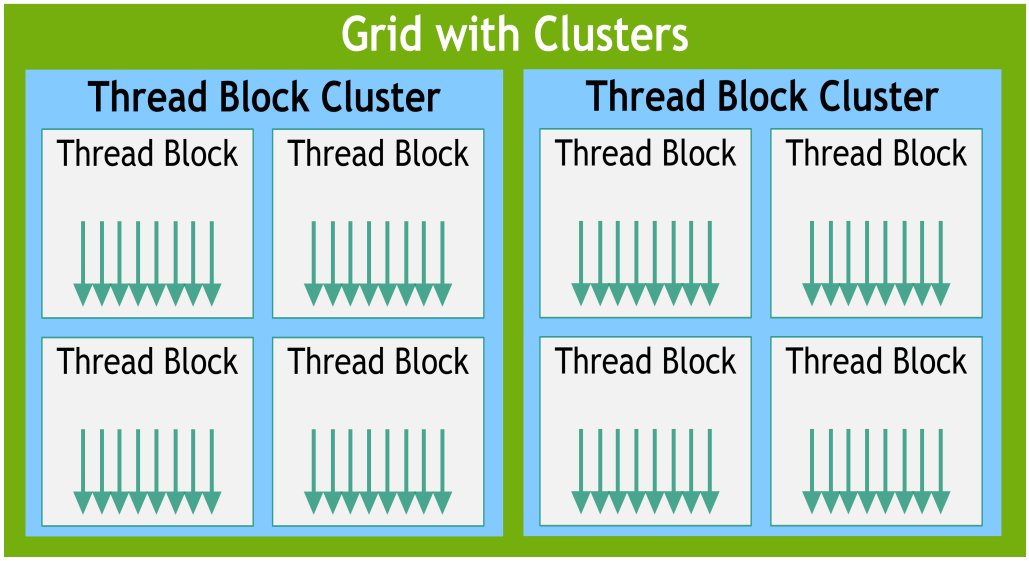
De esta manera es posible escalar el núcleo de la siguiente manera:

Figura 8.2.3: Escalamiento GPU



Al llamar un núcleo CUDA este se ejecutará N veces en paralelo por N subprocesos CUDA diferentes, sin embargo, CUDA nos permite llamar más de un núcleo obteniendo así el siguiente modelo.

Figura 8.2.4: Grupo de núcleos CUDA



8.3. Especificaciones técnicas del equipo empleado

para poder implementar los códigos generados con anterioridad, se empleó un equipo HP con las siguientes características:

- 2 GPU 2080 ti
- 2 GPU 1080 ti
- 90 Gigas de RAM
- 1 procesador xeon
- 1 disco duro de 1tb mecánico

Bibliografía

[1] Ruben Santamaria O. (12-2023). *Molecular Dynamics*. Springer Cham. Primera edición

[2] Isasi Viñuela P. y Galván León I.M.(2004). *Redes de neuronas artificiales*. Pearson educacion. S.A. Madrid

[3] García Cabello, J. (11-2002). *Mathematical Neural Networks*. Axioms. https://doi.org/10.3390/axioms11020080. [Consultado el 20 de marzo de 2022]

[4] Kiprono Elijah Koech . (07-2002). *How Does Back Propagation Work in Neural Networks?*. https://towardsdatascience.com/how-does-back-propagation-work-in-neural-networks-with-worked-example-bc59dfb97f48. [Consultado el 15 de julio de 2022]

[5] Goldstein .H, Poole .C y Safko .J (2014). *Classical mechanics*. Tercera edición. 150,154

[6] Gonzalez .R y Woods .R. (2018) *Digital image processing*. Pearson. Cuarta edición

[7] NVIDIA Corporation & affiliates. (11-2023) *CUDA C++ Programming Guide*. https://docs.nvidia.com/cuda/cuda-c-programming-guide/index.html#notice. [Consultado el 25 de noviembre de 2023]

[8] I.Foodfellow, Y. Bengio y A. Courville. (2016) *Deep Learning*. MIT press, Cambridge, Reino unido

[9] Stanford University *Guiá de los planes de estudio*. https://cs224d.stanford.edu/syllabus.html. [Consultado el 12 de febrero de 2022]

[10] May, Jeffrey A (06-1997). *Using artificial neural networks to identify unexploded ordnance*. Monterey, Calif. : Naval Postgraduate School ; Springfield. Pag (23-34)

[11] International Work-Conference on Artificial and Natural Neural Networks, Mira, J. Prieto A. (2001). *Connectionist Models of Neutons, Learning Processes and Artifical Intelligence*. Berlin ; New York : Springer. Pag 712-718

[12] Nii O. Attoh-Okine y Bilal M. Ayyub. (2005). *Applied research in uncertainty modeling and analysis*. New York, NY : Springer. Pag(158-164, 226-240)

[13] Harvey, Robert L (1994). *Neural network principles*. Englewood Cliffs, NJ : Prentice Hall. Pag(158-164, 226-240)

[14] Korn, Granino A.(1991). *Neural network experiments on personal computers and workstations*. Cambridge, Mass. : MIT Press. Pag(142-146)

[15] Josh Paterson y Adam Gibson(2017). *Deep learning : a practitioner's approach*. Sebastopol, CA : O'Reilly Media, Inc. Pag(40-80, 124-140)

[16] Raschka, Sebastian(2015). *Python machine learning : unlock deeper insights into machine learning with this vital guide to cutting-edge predictive analytics*. Birmingham, UK : Packt Publishing Ltd. Pag(17-47)

[17] Bernd Jähne(2002). *Digital image processing*. Berlin ; New York : Springer. Pag(328-330)

[18] Scott E. Umbaugh(2011). *Digital image processing and analysis : human and computer vision applications with CVIPtools*. Boca Raton : Taylor & Francis. Pag(50-62, 144-176)

[19] Louis J. Galbiati jr.(1990). *Machine vision and digital image processing fundamentals*. Englewood Cliffs, N.J. : Prentice Hall. Pag(113-123)

[20] Aurélien Géron(2017). *Hands-on machine learning with Scikit-Learn and TensorFlow : concepts, tools, and techniques to build intelligent systems*.Sebastopol, CA : O'Reilly Media. Pag(253-272)

[21] Nikhil Buduma(2017). *textsFundamentals of deep learning : designing next-generation machine intelligence algorithms*. Sebastopol, CA : O'Reilly Media. Pag(17-62)

[22] Bernhard Mehlig(2021). *Machine learning with neural networks*. Department of Physics UNIVERSITY OF GOTHENBURG Göteborg, Sweden. Pag(1-12, 73-90)

[23] Martin T. Hagan,Howard B. Demuth,Orlando De Jesús y Mark Hudson Beale (2014). *Neural Network Design*. 2nd Edition, eBook. Pag(36-70). https://hagan.okstate.edu/NNDesign.pdf

[24] LISA Lab(2015). *Deep Learning Tutorials*. University of Montreal. Pag(17-24, 35-62). https://www.cs.virginia.edu/yanjun/teach/2014f/lecture/L20-handout-deeplearningTutorial.pdf

[25] James McCaffrey. (2018). *Keras Succinctly*. Syncfusion Inc.

[26] jeff heaton(2005). *Introduction to Neural Networks with Java*. Heaton Research, Inc. Pag(49-125). https://www.heatonresearch.com/book/

[27] Arnulf Jentzen, Benno Kuckuck y Philippe von Wurstemberger(2023). *Mathematical Introduction to Deep Learning: Methods, Implementations, and Theory*. eBook. Pag(21-29). https://arxiv.org/pdf/2310.20360.pdf

[28] Mukesh D. Patil, Gajanan K. Birajdar y Sangita S Chaudhari. (2023). *Computational Intelligence In Image And Video Processing*. Chapman & Hall Book /CRC Press. Pag(1-33)

[29] Yunji Chen, Ling Li, Wei Li, Qi Guo, Zidong Du y Zichen Xu(2017). *AI Computing Systems An Application-Driven Perspective*.Morgan Kaufmann Publishers an imprint of Elsevier.

[30] Thomas Plé, Louis Lagardère, y Jean-Philip Piquemal. *Force-field-enhanced neural network interactions: from local equivariant embedding to atom-in-molecule properties and long-range effects*.Sorbonne Université, LCT, UMR 7616 CNRS, F-75005, Paris, France.

[31] Christian Devereux, Yoona Yang, Carles Martí, Judit Zádor, Michael S. Eldred y Habib N. Najm. (14-11-2023) . *Force Training Neural Network Potential Energy Surface Models*. Combustion Research Facility, Sandia National Laboratories,

Livermore, CA 94551, USA.

[32] F. Bivort Haiek, A. M. P. Mendez, C. C. Montanari y D. M. Mitnik. (22-12-2022) . *ESPNN: A novel electronic stopping power neural-network code built on the IAEA stopping power database. I. Atomic targets.* AIP Publishing

[33] Fotografía por Dwight Hooker, *Playmate del mes*, Playboy. (1972).Base de datos de imágenes USC-SIPI.