

Reprezentacje atomów bazujące na uwadze

TABLE I: Features included in each of the 12 atom representations.

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
atom type	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓
neighbors	✓		✓						✓	✓	✓	✓
hydrogens	✓			✓				✓		✓	✓	✓
formal charge	✓				✓			✓	✓		✓	✓
in ring	✓					✓		✓	✓	✓		✓
aromatic	✓						✓	✓	✓	✓	✓	

TABLE III: Average test mean squared error of all models trained with different representations (no model selection).

representation	rat	human	qm9-random	esol-random	esol-scaffold
1	0.301 \pm 0.102	0.291 \pm 0.090	34100 \pm 65370	0.39 \pm 0.29	0.37 \pm 0.21
2	0.339 \pm 0.087	0.314 \pm 0.075	35990 \pm 65780	0.49 \pm 0.29	0.47 \pm 0.21
3	0.322 \pm 0.101	0.303 \pm 0.085	34820 \pm 65340	0.37 \pm 0.29	0.41 \pm 0.19
4	0.311 \pm 0.104	0.299 \pm 0.073	35140 \pm 65300	0.42 \pm 0.29	0.38 \pm 0.22
5	0.342 \pm 0.092	0.315 \pm 0.078	35740 \pm 65670	0.49 \pm 0.30	0.47 \pm 0.20
6	0.329 \pm 0.101	0.310 \pm 0.083	35210 \pm 65410	0.46 \pm 0.29	0.42 \pm 0.21
7	0.326 \pm 0.100	0.308 \pm 0.084	35930 \pm 65640	0.48 \pm 0.28	0.47 \pm 0.19
8	0.303 \pm 0.098	0.295 \pm 0.083	34460 \pm 65300	0.44 \pm 0.28	0.37 \pm 0.22
9	0.299 \pm 0.104	0.295 \pm 0.083	34670 \pm 65290	0.38 \pm 0.28	0.38 \pm 0.20
10	0.297 \pm 0.093	0.289 \pm 0.078	34040 \pm 65270	0.38 \pm 0.29	0.36 \pm 0.21
11	0.300 \pm 0.097	0.294 \pm 0.084	34250 \pm 65360	0.39 \pm 0.28	0.37 \pm 0.20
12	0.302 \pm 0.099	0.290 \pm 0.080	34060 \pm 65340	0.38 \pm 0.29	0.36 \pm 0.20

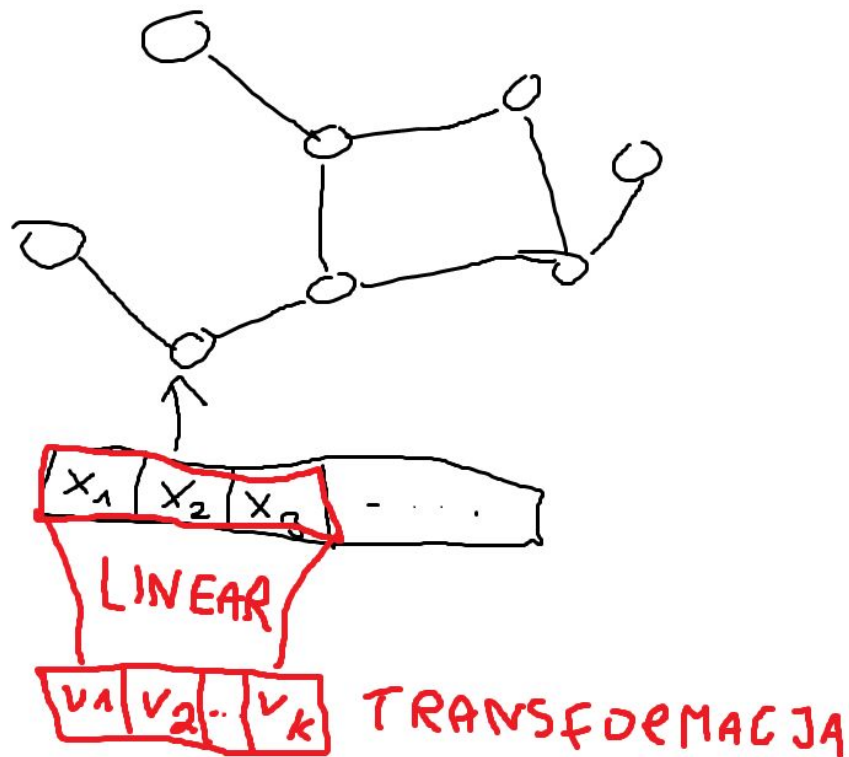
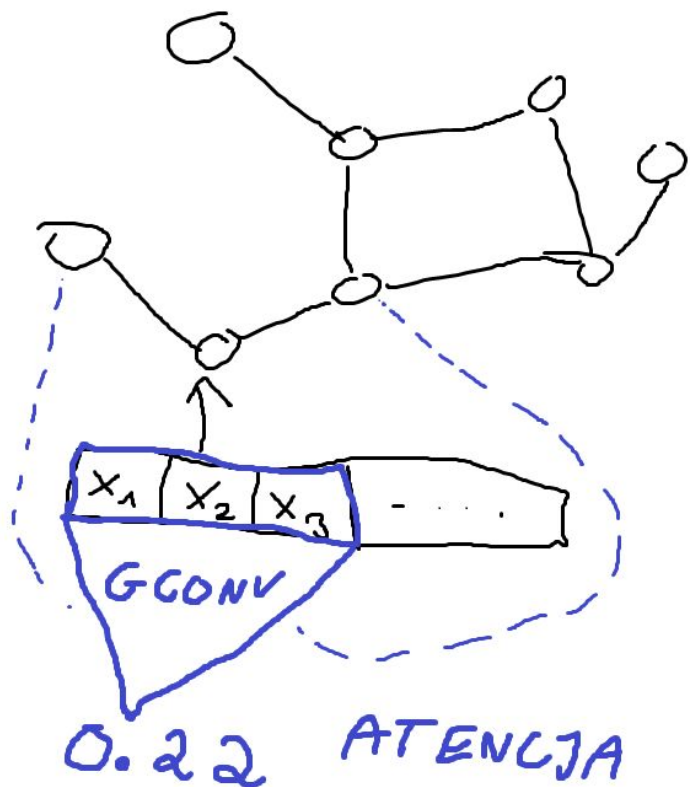
Wstęp

Wstęp

TABLE IV: Different featurisation methods used in the literature.

size	representation 1 [2]
	description
12	one-hot vector specifying the type of atom
6	number of heavy neighbours as one-hot vector
5	number of hydrogen atoms as one-hot vector
1	formal charge
1	is in a ring
1	is in aromatic system

Architektura modelu - attention pooling



Użyte datasety

- ADME - Solubility_AqSolDB
- QM9 - g298 (do transfer learningu)
- ESOL - molecular properties
- Human - czas połowicznego rozkładu związków znalezionych w ciele człowieka
- Rat - czas połowicznego rozkładu związków znalezionych w ciele szczura

Hipoteza badawcza nr 1

- Dodanie warstwy liniowej lub attention pooling do stworzenia trenowalnej reprezentacji poprawia wyniki przewidywań modelu.
- QM9:

	Repr 1	Repr 10	Attention Pooling v2 - size = 3	Attention Pooling v2 - size = 35	Attention Pooling v2 - size = 100
1 convs, 64 channels	0.47	0.47	0.38	0.38	0.35
1 convs, 512 channels	0.47	0.47	0.38	0.41	0.37
3 convs, 64 channels	0.39	0.39	0.46	0.37	0.38
3 convs, 512 channels	0.41	0.39	0.39	0.39	0.38
5 convs, 64 channels	0.44	0.44	0.77	0.53	0.56
5 convs, 512 channels	0.45	0.45	0.49	0.53	0.52

Hipoteza badawcza nr 1

- ESOL

	Repr 1	Repr 10	Attention Pooling v2 - size = 3	Attention Pooling v2 - size = 35	Attention Pooling v2 - size = 100
1 convs, 64 channels	1.47	1.49	1.41	1.38	1.43
1 convs, 512 channels	1.48	1.50	1.42	1.51	1.37
3 convs, 64 channels	1.32	1.32	1.35	1.30	1.39
3 convs, 512 channels	1.31	1.30	1.40	1.26	1.26
5 convs, 64 channels	1.32	1.31	1.35	1.37	1.32
5 convs, 512 channels	1.47	1.29	1.46	1.30	1.34

Hipoteza badawcza nr 1

- Human

	Repr 1	Repr 10	Attention Pooling v2 - size = 3	Attention Pooling v2 - size = 35	Attention Pooling v2 - size = 100
1 convs, 64 channels	1.41	1.45	1.39	1.38	1.36
1 convs, 512 channels	1.35	1.35	1.38	1.39	1.37
3 convs, 64 channels	1.42	1.37	1.34	1.37	1.39
3 convs, 512 channels	1.32	1.40	1.44	1.47	1.35
5 convs, 64 channels	1.34	1.32	1.38	1.39	1.46
5 convs, 512 channels	1.45	1.50	1.42	1.43	1.36

Hipoteza badawcza nr 1

- Rat

	Repr 1	Repr 10	Attention Pooling v2 - size = 3	Attention Pooling v2 - size = 35	Attention Pooling v2 - size = 100
1 convs, 64 channels	1.85	1.88	1.87	1.83	1.87
1 convs, 512 channels	1.85	1.82	1.85	1.84	1.82
3 convs, 64 channels	1.82	1.81	1.92	1.87	1.86

Hipoteza badawcza nr 2

- Attention pooling daje warstwę interpretowalności do modelu, pozwalając odszukać ważne cechy atomów dla danego zadania. QM9:

AtomicNum	Degree	TotalNumHs	ImplicitValence	Hybridization	FormalCharge	IsInRing	IsAromatic	NumRadicalElectrons
0	0.47	0.06	0.06	0.08	0.06	0.11	0.06	0.06
1	0.55	0.05	0.06	0.07	0.05	0.09	0.05	0.05
2	0.48	0.06	0.06	0.08	0.06	0.10	0.06	0.06
3	0.53	0.05	0.06	0.07	0.05	0.09	0.05	0.05
4	0.49	0.06	0.06	0.08	0.06	0.10	0.06	0.06
5	0.48	0.06	0.06	0.08	0.06	0.10	0.06	0.06
6	0.48	0.06	0.06	0.08	0.06	0.10	0.06	0.06
7	0.49	0.05	0.06	0.07	0.05	0.10	0.05	0.05
8	0.49	0.05	0.06	0.07	0.05	0.10	0.05	0.05
9	0.47	0.06	0.06	0.08	0.06	0.11	0.06	0.06

dla pojedynczych
atomów

AtomicNum	Degree	TotalNumHs	ImplicitValence	Hybridization	FormalCharge	IsInRing	IsAromatic	NumRadicalElectrons
1	0.26	0.08	0.08	0.14	0.07	0.14	0.07	0.07

dla całego batcha

Hipoteza badawcza nr 2

- ESOL

	AtomicNum	Degree	TotalNumHs	ImplicitValence	Hybridization	FormalCharge	IsInRing	IsAromatic	NumRadicalElectrons
0	0.53	0.03	0.03	0.03	0.27	0.03	0.03	0.05	0.03
1	0.17	0.06	0.06	0.08	0.34	0.06	0.06	0.11	0.06
2	0.17	0.06	0.06	0.08	0.34	0.06	0.06	0.11	0.06
3	0.17	0.06	0.06	0.08	0.34	0.06	0.06	0.11	0.06
4	0.17	0.06	0.06	0.08	0.34	0.06	0.06	0.11	0.06

	AtomicNum	Degree	TotalNumHs	ImplicitValence	Hybridization	FormalCharge	IsInRing	IsAromatic	NumRadicalElectrons
1	0.25	0.06	0.06	0.11	0.22	0.06	0.06	0.11	0.06
2	0.24	0.06	0.06	0.11	0.22	0.06	0.06	0.11	0.06
3	0.23	0.07	0.07	0.11	0.22	0.07	0.07	0.11	0.07
4	0.23	0.07	0.07	0.11	0.22	0.07	0.07	0.11	0.07
5	0.23	0.07	0.07	0.11	0.22	0.07	0.07	0.11	0.07

Hipoteza badawcza nr 2

- Human

	AtomicNum	Degree	TotalNumHs	ImplicitValence	Hybridization	FormalCharge	IsInRing	IsAromatic	NumRadicalElectrons
0	0.034916	0.034916	0.057138	0.664600	0.068766	0.034916	0.034916	0.034916	0.034916
1	0.033937	0.033937	0.055536	0.674002	0.066839	0.033937	0.033937	0.033937	0.033937
2	0.088251	0.088251	0.144417	0.161766	0.164313	0.088251	0.088251	0.088251	0.088251
3	0.036922	0.036922	0.060421	0.645326	0.072718	0.036922	0.036922	0.036922	0.036922
4	0.091089	0.091089	0.149062	0.125004	0.179398	0.091089	0.091089	0.091089	0.091089
5	0.039687	0.039687	0.064946	0.618768	0.078163	0.039687	0.039687	0.039687	0.039687
6	0.035639	0.035639	0.058321	0.657657	0.070190	0.035639	0.035639	0.035639	0.035639
7	0.036845	0.036845	0.060295	0.646065	0.072566	0.036845	0.036845	0.036845	0.036845
8	0.036387	0.036387	0.059546	0.650466	0.071664	0.036387	0.036387	0.036387	0.036387
9	0.038912	0.038912	0.063677	0.626213	0.076637	0.038912	0.038912	0.038912	0.038912

dla pojedynczych
atomów

	AtomicNum	Degree	TotalNumHs	ImplicitValence	Hybridization	FormalCharge	IsInRing	IsAromatic	NumRadicalElectrons
1	0.063041	0.063041	0.203187	0.298521	0.120044	0.063041	0.063041	0.063041	0.063041

dla całego batcha

Hipoteza badawcza nr 2

- Rat

	AtomicNum	Degree	TotalNumHs	ImplicitValence	Hybridization	FormalCharge	IsInRing	IsAromatic	NumRadicalElectrons
0	0.05	0.29	0.05	0.24	0.09	0.05	0.1	0.07	0.05
1	0.05	0.29	0.05	0.24	0.09	0.05	0.1	0.07	0.05
2	0.05	0.29	0.05	0.24	0.09	0.05	0.1	0.07	0.05
3	0.05	0.29	0.05	0.24	0.09	0.05	0.1	0.07	0.05
4	0.05	0.29	0.05	0.24	0.09	0.05	0.1	0.07	0.05
5	0.05	0.29	0.05	0.24	0.09	0.05	0.1	0.07	0.05
6	0.05	0.29	0.05	0.24	0.09	0.05	0.1	0.07	0.05
7	0.05	0.29	0.05	0.24	0.09	0.05	0.1	0.07	0.05
8	0.05	0.29	0.05	0.24	0.09	0.05	0.1	0.07	0.05
9	0.05	0.29	0.05	0.24	0.09	0.05	0.1	0.07	0.05

dla pojedynczych
atomów

	AtomicNum	Degree	TotalNumHs	ImplicitValence	Hybridization	FormalCharge	IsInRing	IsAromatic	NumRadicalElectrons
1	0.07	0.20	0.10	0.12	0.11	0.07	0.13	0.13	0.07

dla całego batcha

Hipoteza badawcza nr 3

- Nauczona warstwa kodująca cechy atomów może zostać użyta do innych zadań (transfer learning)
- (big) uczona na 50 000 cząsteczkach, reszta na 5000

Hipoteza badawcza nr 3

- QM9 -> ADME

Out[20]:

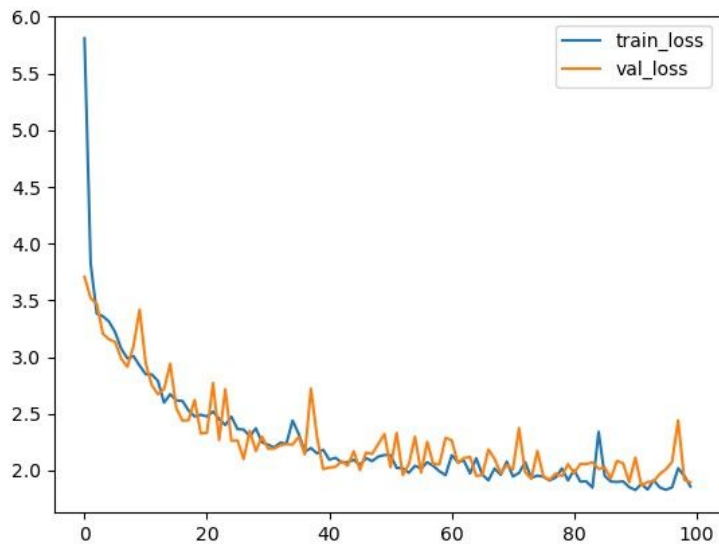
	Repr 1	Repr 10	transfer learning - size = 3	transfer learning - size = 35	transfer learning - size = 100	transfer learning - size = 35 (big)
1 convs, 64 channels	1.90	1.90	2.22	1.92	1.95	1.79
1 convs, 512 channels	1.92	1.90	2.24	1.93	2.17	1.78
3 convs, 64 channels	1.40	1.46	1.65	1.42	1.47	1.33
3 convs, 512 channels	1.43	1.43	1.75	1.41	1.50	1.35
5 convs, 64 channels	1.39	1.43	1.60	1.36	1.47	1.67
5 convs, 512 channels	1.50	1.56	2.33	1.38	1.50	1.46

Hipoteza badawcza nr 3

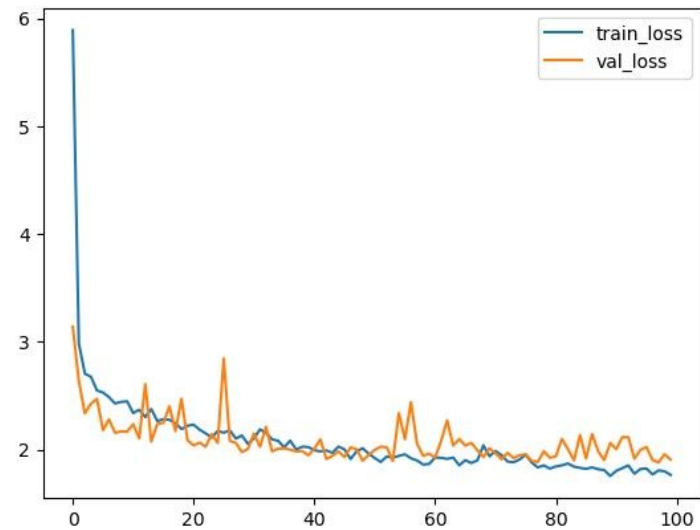
- QM9 -> ESOL

	Repr 1	Repr 10	transfer learning - size = 3	transfer learning - size = 35	transfer learning - size = 100	transfer learning - size = 35 (big)
1 convs, 64 channels	1.49	1.48	2.33	1.64	1.56	1.35
1 convs, 512 channels	1.48	1.48	2.35	1.62	1.53	1.35
3 convs, 64 channels	1.37	1.40	1.71	1.58	1.52	1.30
3 convs, 512 channels	1.44	1.45	2.14	1.46	1.55	1.17
5 convs, 64 channels	1.46	1.46	1.40	1.52	1.51	1.25
5 convs, 512 channels	1.52	1.56	2.34	1.29	1.45	1.28

Przykładowe krzywe uczenia



size 35 solubility



size 35 solubility - transfer learning