



UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI PADOVA

Dipartimento di Fisica e Astronomia “Galileo Galilei”

Corso di Laurea in Fisica

Anno Accademico 2021/2022

# COARSE-GRAINING AUTO ENCODERS PER LA DINAMICA MOLECOLARE

Relatore: Dott. Emanuele Locatelli

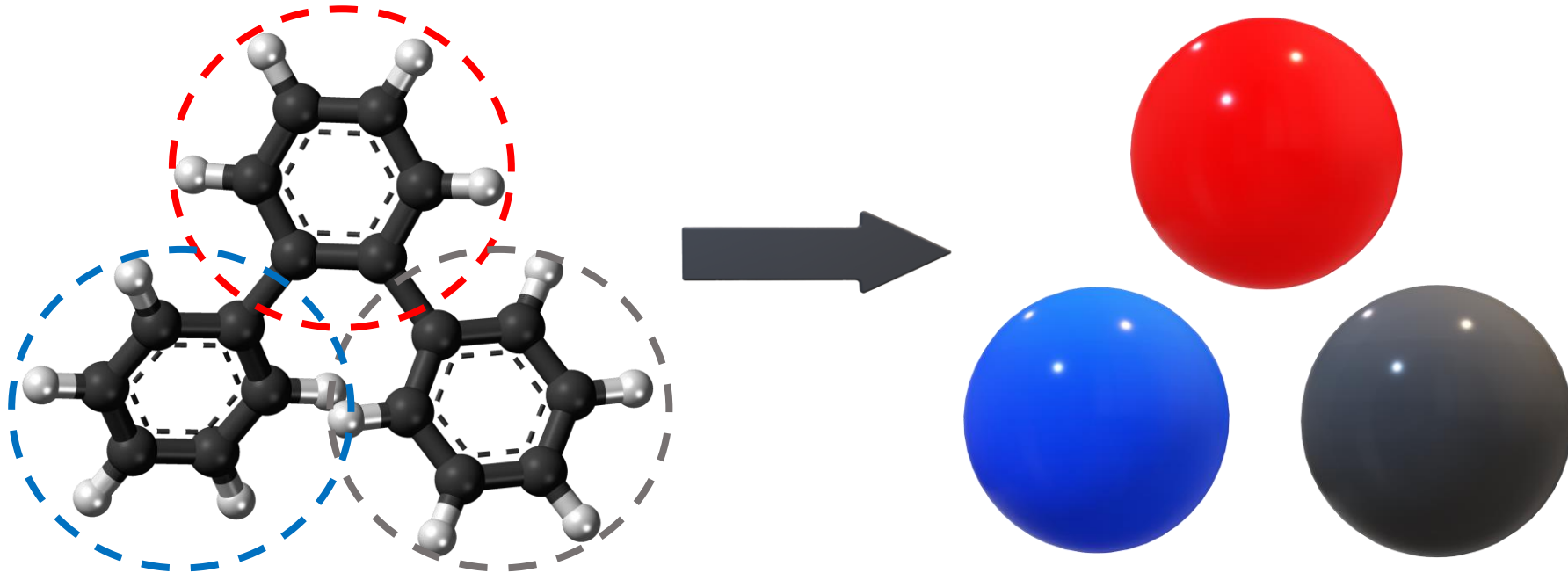
Correlatore: Dott. Francesco Mambretti

Laureando: Giacomo Di Prima

# COARSE-GRAINING

Consiste nel rappresentare gruppi di atomi o molecole come siti di interazione (CG), ovvero punti dotati di massa e privi di struttura.

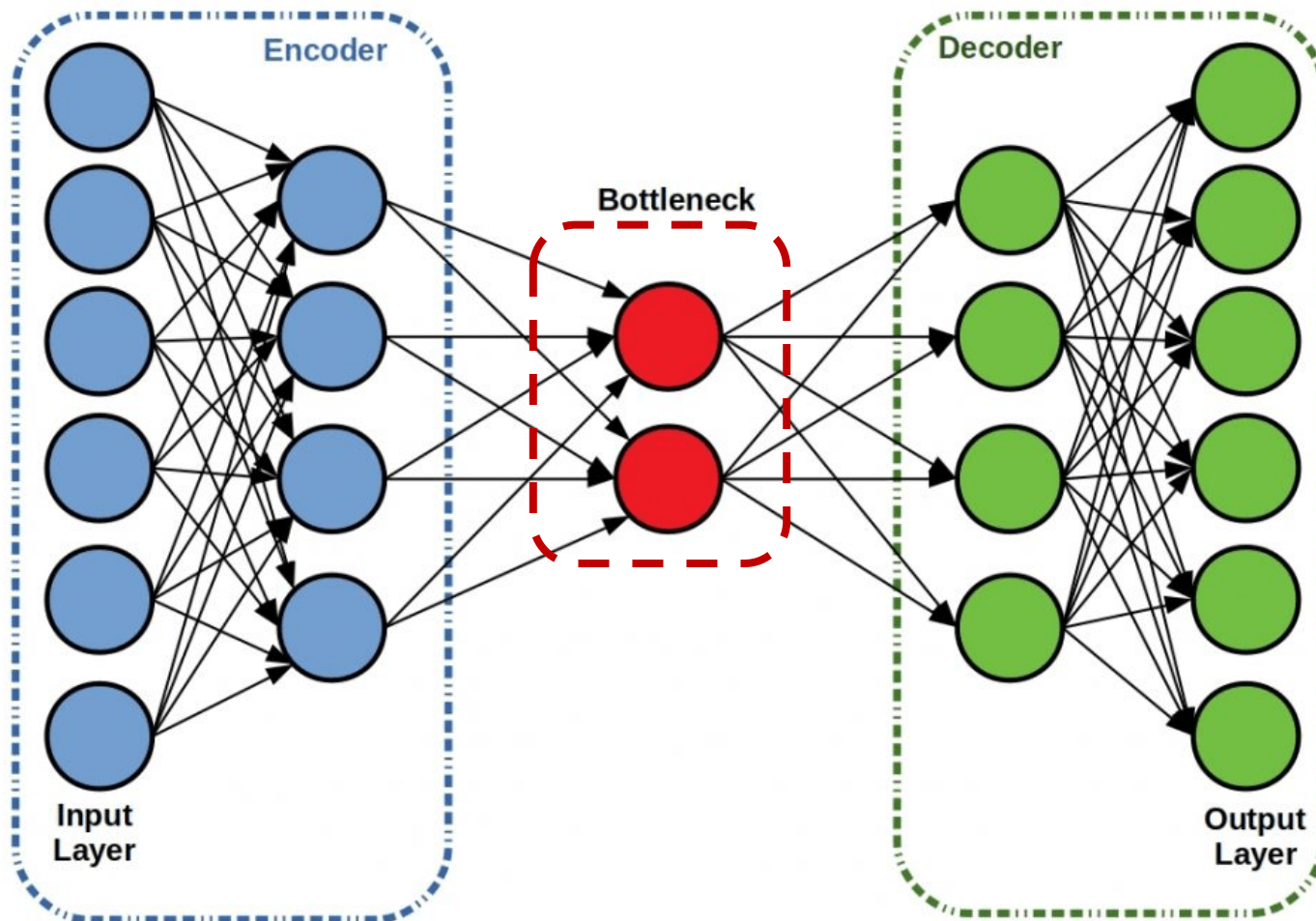
Permette di ridurre il numero di gradi di libertà necessari a descrivere il sistema.



# AUTOENCODERS (AEs)

Rete lineare che impara a copiare in output l'input che riceve.

Il processo di apprendimento avviene attraverso la minimizzazione di una funzione che descrive quanto sono dissimili l'input e l'output.



Per via del bottleneck i dati vengono proiettati in un spazio di dimensione inferiore rispetto a quella dell'input. Questo spazio è chiamato spazio latente.

# COARSE-GRAINING AUTO-ENCODERS FOR MOLECULAR DYNAMICS

## Obiettivi

**Trovare una rappresentazione CG**

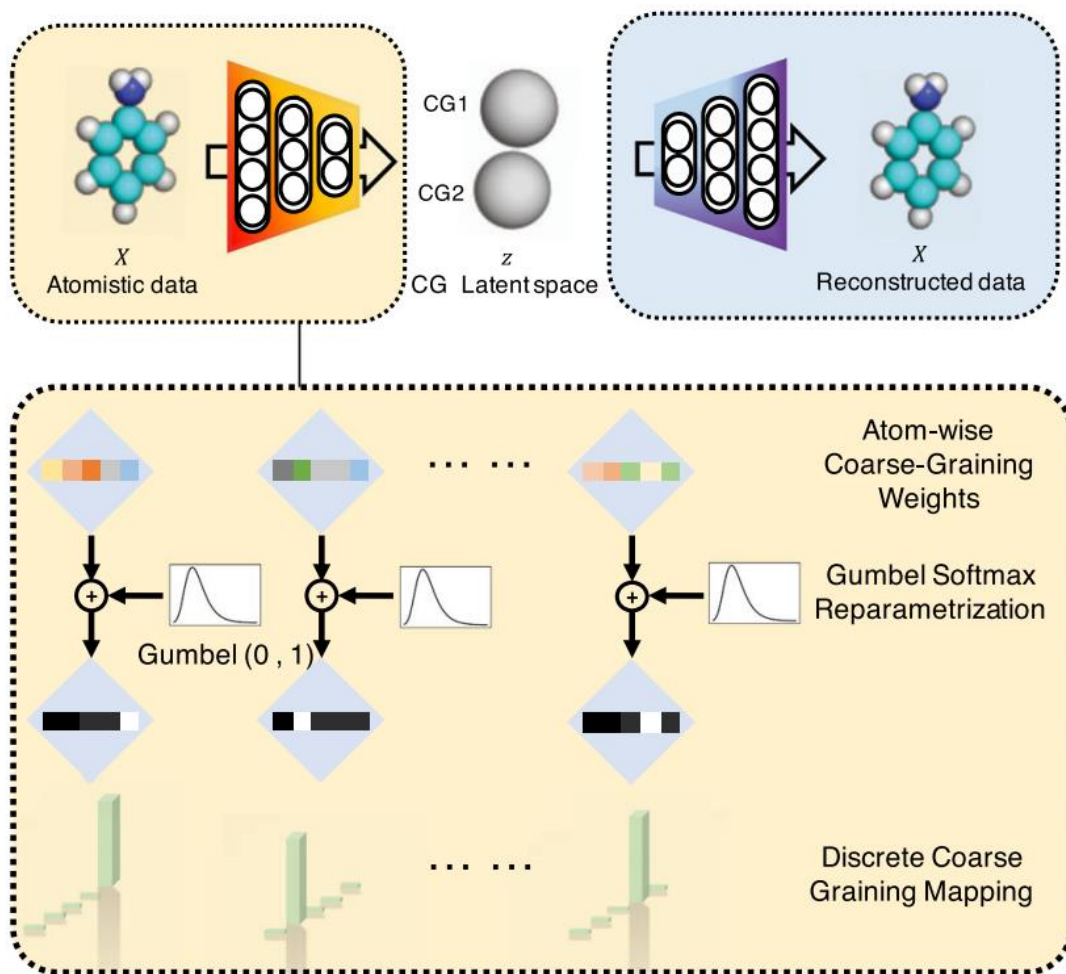
Codifica coordinate atomistiche in coordinate CG e viceversa.

**Trovare un potenziale CG (force matching)**

Trova il potenziale CG che genererebbe la forza media che agisce su tutti gli atomi.

# COARSE-GRAINING AUTO-ENCODERS FOR MOLECULAR DYNAMICS

## Architettura - Parametri



Autoencoder lineare, i parametri della rete corrispondono alle probabilità che un determinato atomo venga assegnato ad un determinato sito CG.

Ottimizzazione dei parametri e one-hot encoding

# COARSE-GRAINING AUTO-ENCODERS FOR MOLECULAR DYNAMICS

## Architettura – Loss function

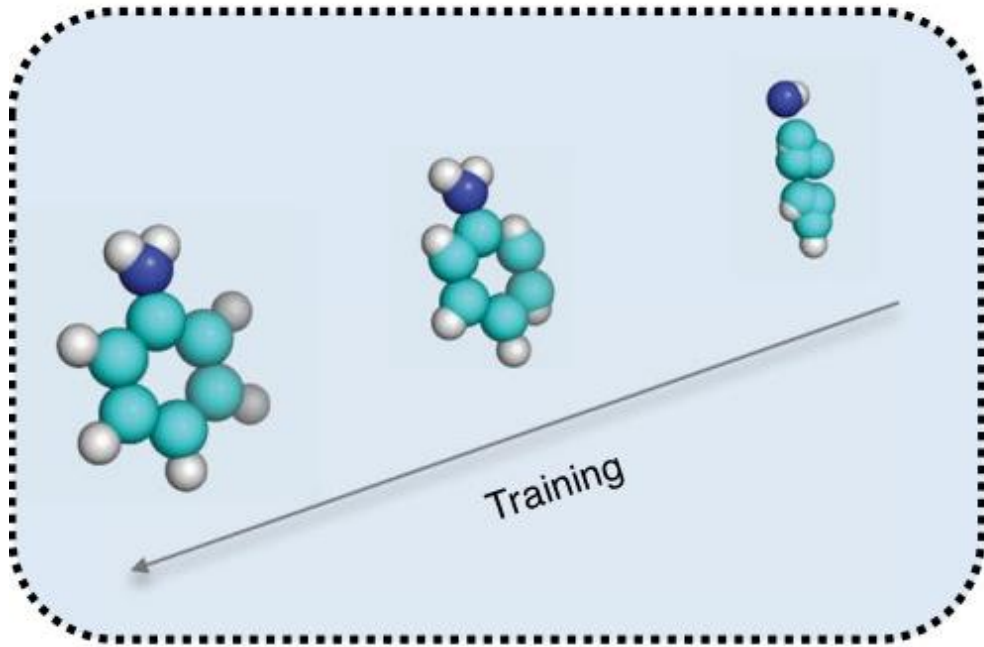
$$L_{ae} = \frac{1}{N} \mathbb{E} \left[ \underbrace{(D(E(x)) - x)^2}_{\text{Ricostruzione}} + \underbrace{\rho F_{\text{inst}}(E(x))^2}_{\text{Regolarizzazione}} \right]$$

**Ricostruzione:** MSE tra i dati originali e quelli ricostruiti

**Regolarizzazione:** dipende dalle forze atomistiche, regolarizza il profilo dell'energia libera.

# COARSE-GRAINING AUTO-ENCODERS FOR MOLECULAR DYNAMICS

## Architettura - Training



Vengono utilizzati migliaia di frames di traiettorie atomistiche di molecole all'equilibrio. Questi contengono le posizioni di ciascun atomo e la forza totale agente su ognuno di essi.



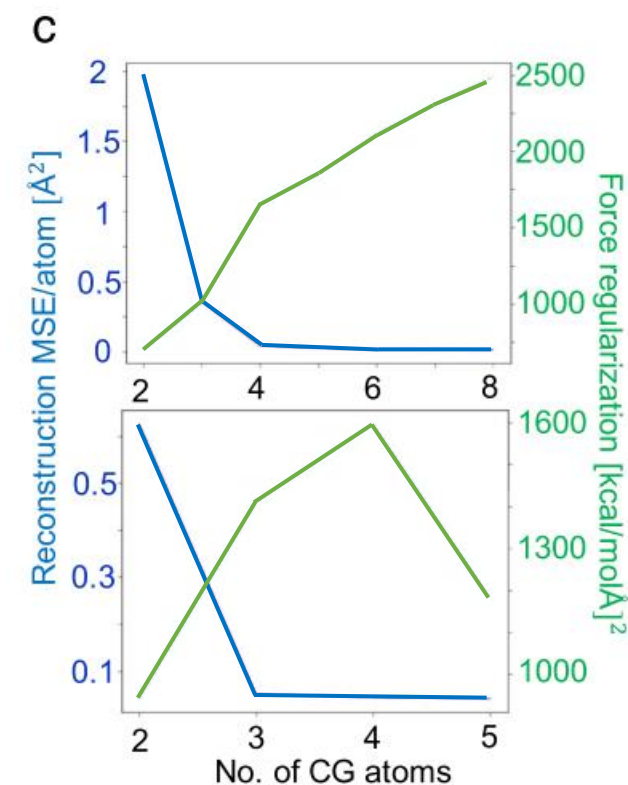
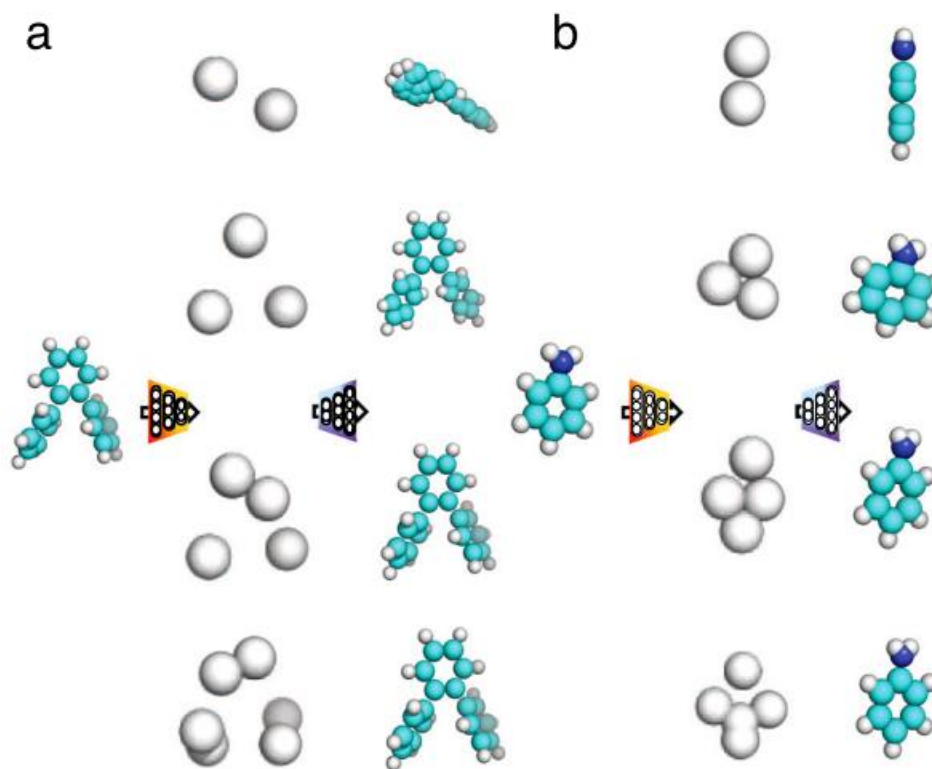
# COARSE-GRAINING AUTO-ENCODERS FOR MOLECULAR DYNAMICS

## Risultati

**a** Encoding e Decoding di OTP

**b** Encoding e Decoding di anilina

**c** Plot delle loss function in funzione del numero di siti CG

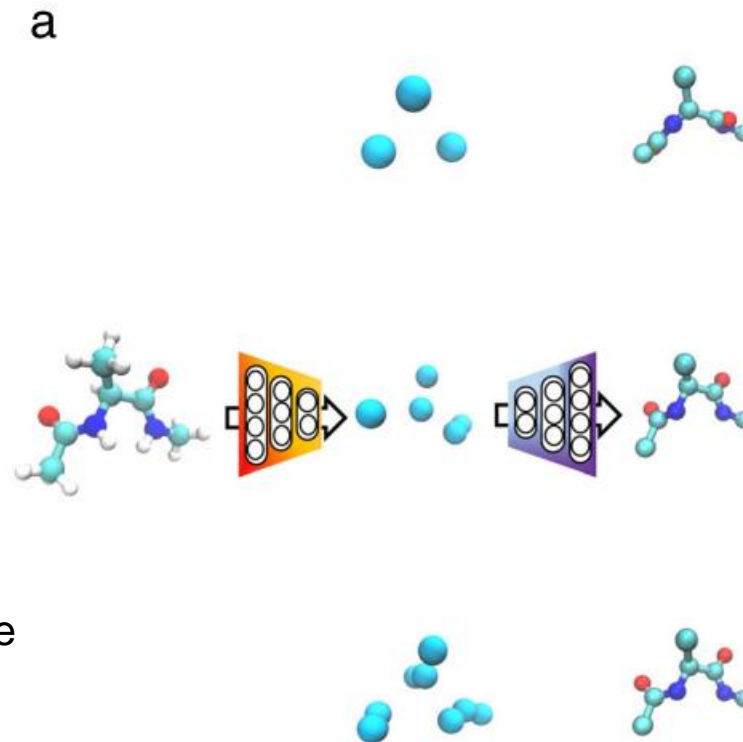




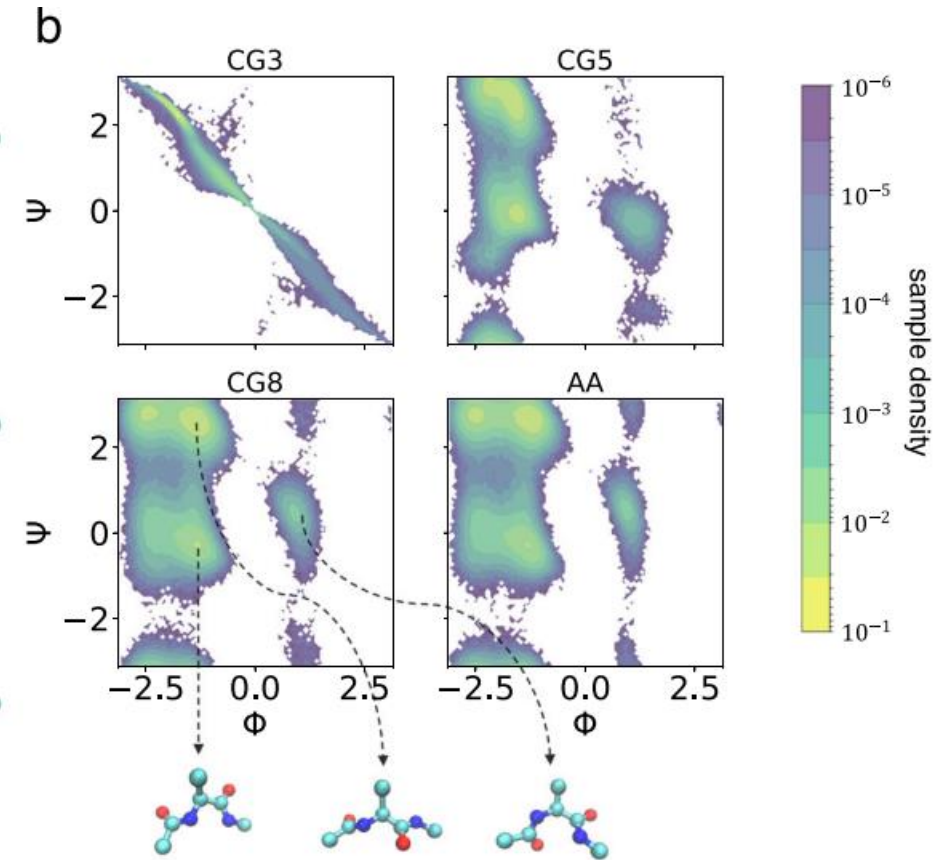
# COARSE-GRAINING AUTO-ENCODERS FOR MOLECULAR DYNAMIC

## Risultati

**a** Encoding e Decoding di alanina dipeptide



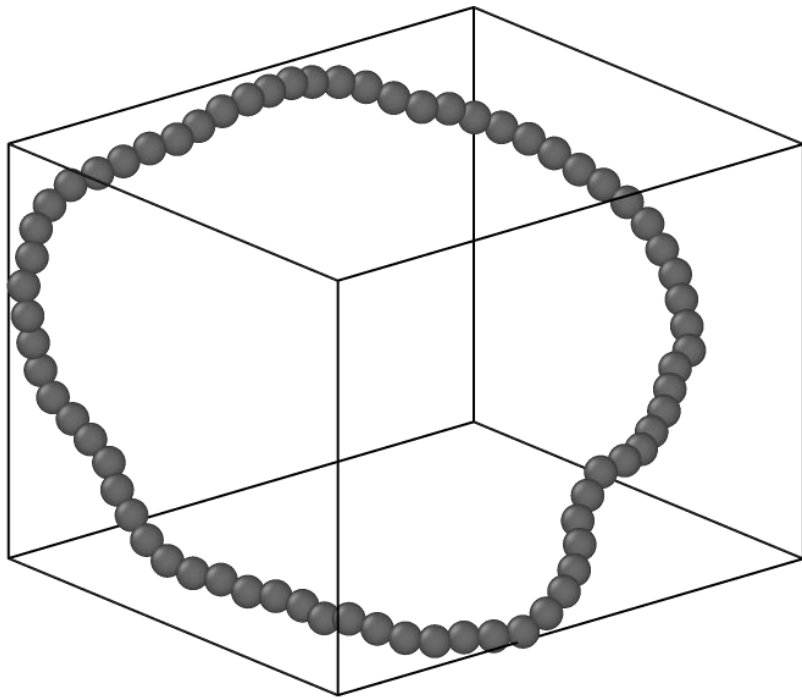
**b** Mappe di Ramachandran per diverse risoluzioni CG



# APPLICAZIONE DEL MODELLO AE AI POLIMERI AD ANELLO

## Dati

Le configurazioni molecolari sono state ottenute da simulazioni atomistiche a temperatura costante. A tale scopo sono stati impiegati due termostati:



### LANGEVIN

Impone ad ogni monomero una forza casuale.

- $L_{eq}$  set di configurazioni all'equilibrio

### NOSE-HOOVER

Utilizza una variabile ausiliaria che regolarizza le fluttuazioni del sistema.

- $NH_{eq}$  set di configurazioni all'equilibrio
- $NH_{neq}$  set di configurazioni fuori dall'equilibrio

# APPLICAZIONE DEL MODELLO AE AI POLIMERI AD ANELLO

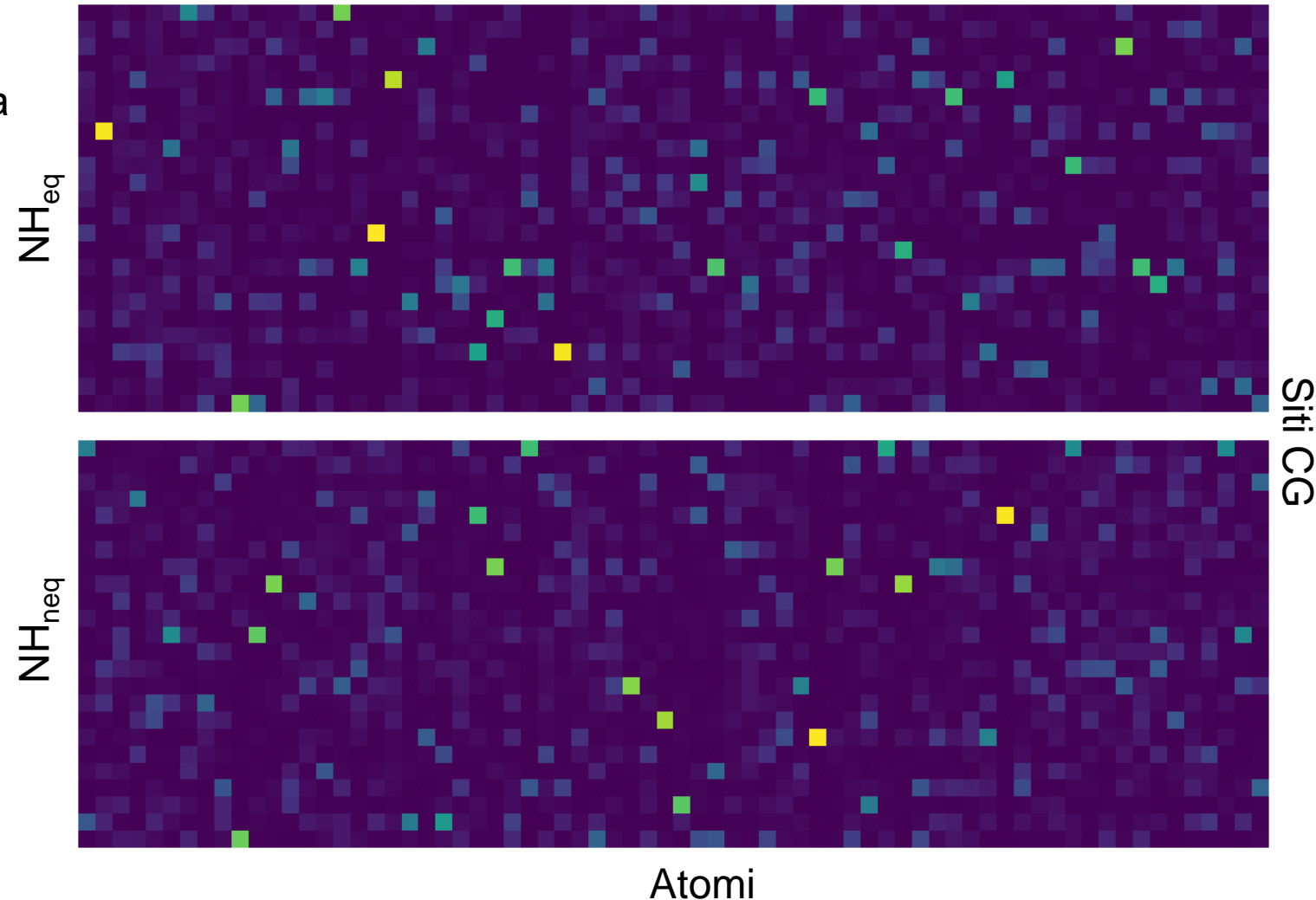
## Training

Sull'asse x si trovano gli atomi della molecola mentre sull'asse y i siti CG ai quali possono essere assegnati.

Le matrici colorate rappresentano i valori relativi dei parametri dell'encoder della rete.

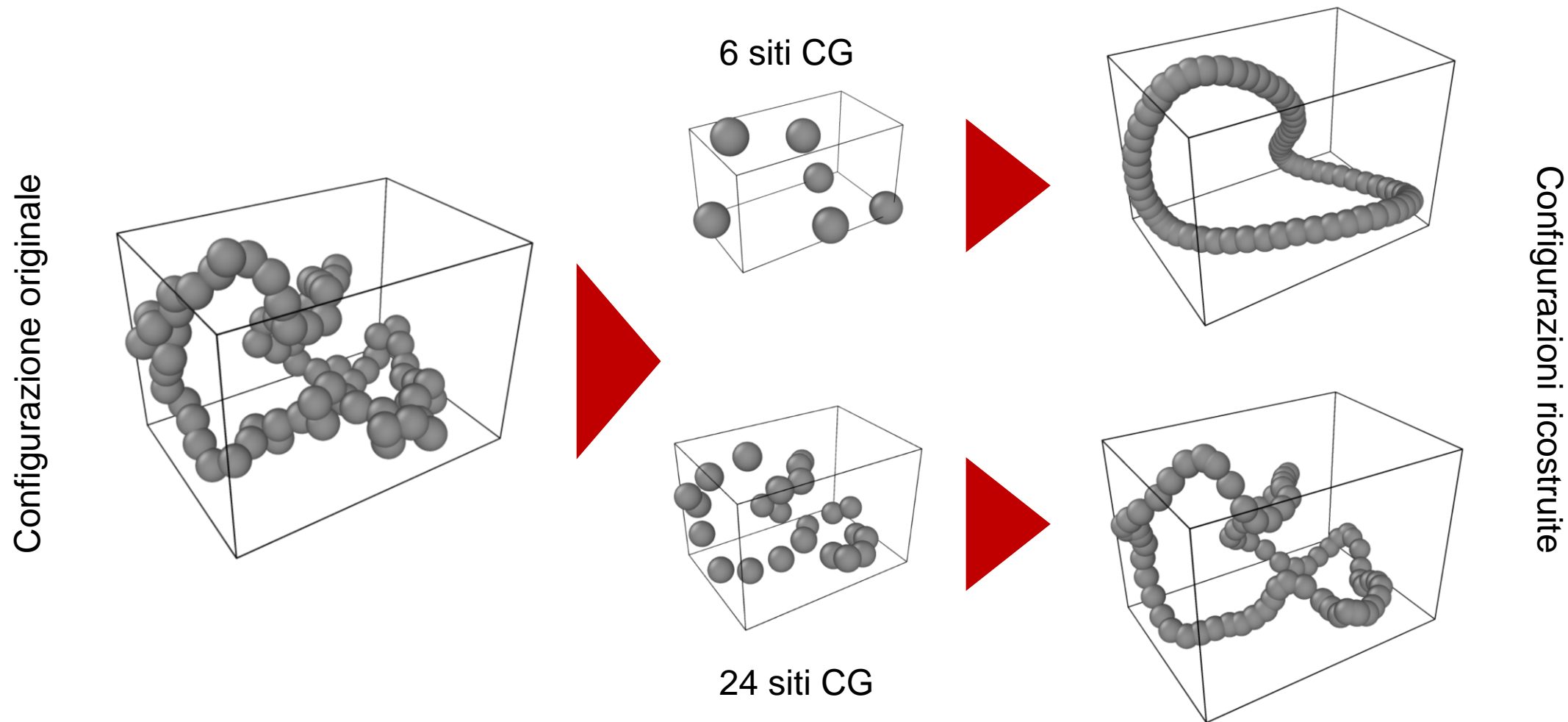
Di lato viene mostrato il processo di ottimizzazione dei parametri della rete avente in input le configurazioni  $NH_{eq}$  e  $NH_{neq}$ .

Ottimizzazione dei parametri della rete



# APPLICAZIONE DEL MODELLO AE AI POLIMERI AD ANELLO

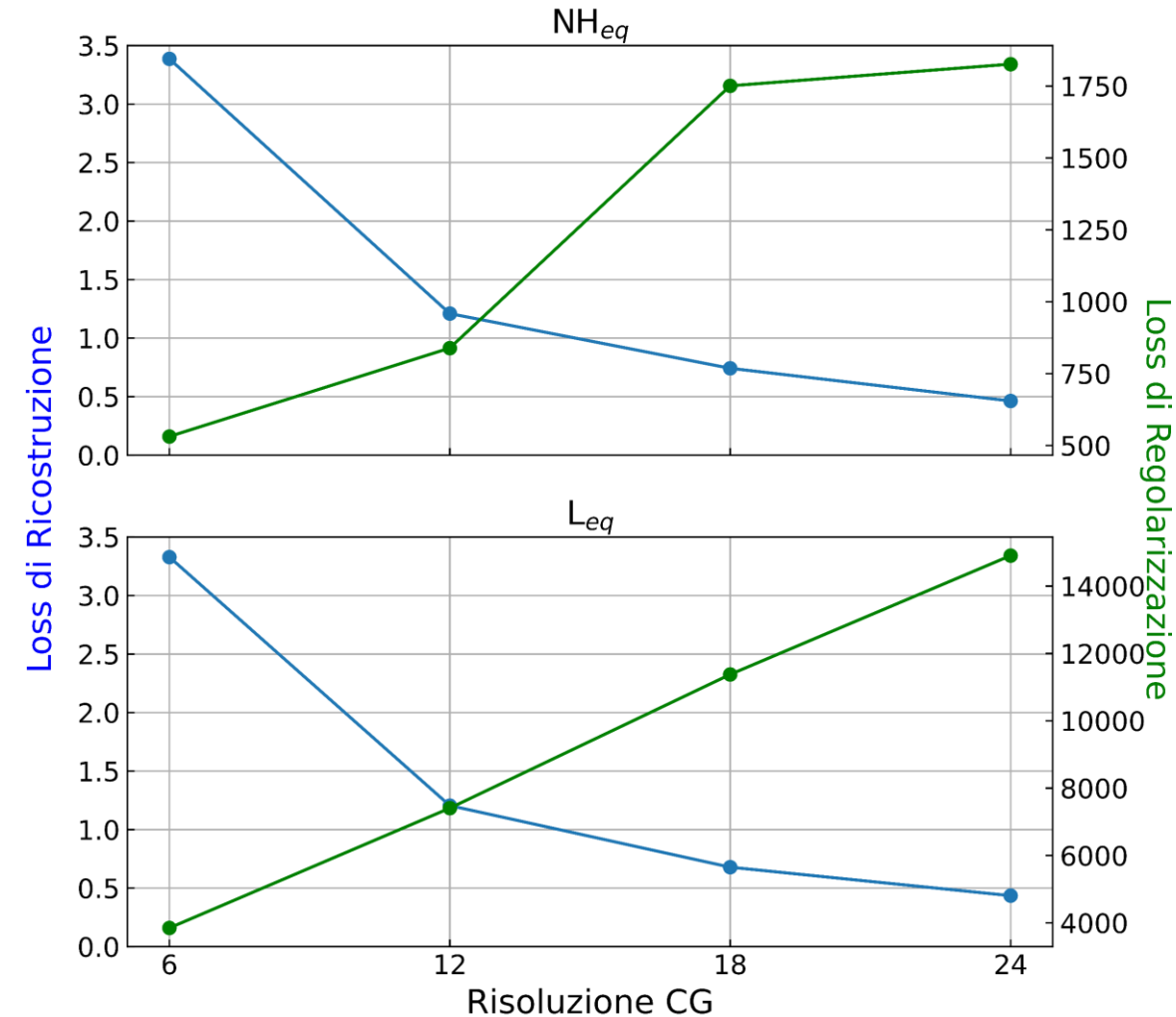
## Risultati



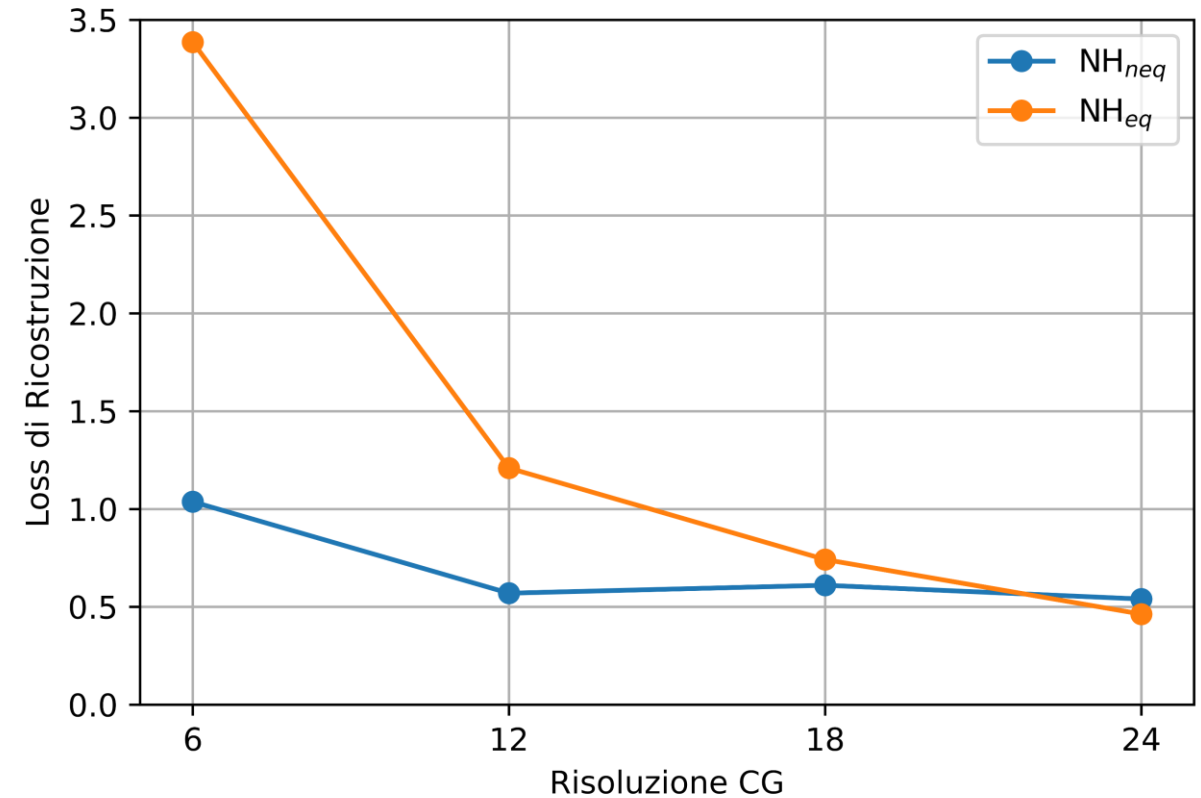
# APPLICAZIONE DEL MODELLO AE AI POLIMERI AD ANELLO

## Risultati

Confronto ricostruzione all'equilibrio: diversi termostati



Confronto loss di ricostruzione tra i dati all'equilibrio e fuori dall'equilibrio:



# APPLICAZIONE DEL MODELLO AE AI POLIMERI AD ANELLO

## Discussione

- Il framework può essere applicato con successo a diverse configurazioni molecolari all'equilibrio riuscendo ad ottenere una rappresentazione CG della molecola.
- Fuori dall'equilibrio, l'AE non è in grado di assegnare gli atomi della molecola a tutti i siti CG che gli vengono messi a disposizione, indipendentemente dal termine di regolarizzazione.

**VI RINGRAZIO PER L'ATTENZIONE**