



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

# SOMMARIO

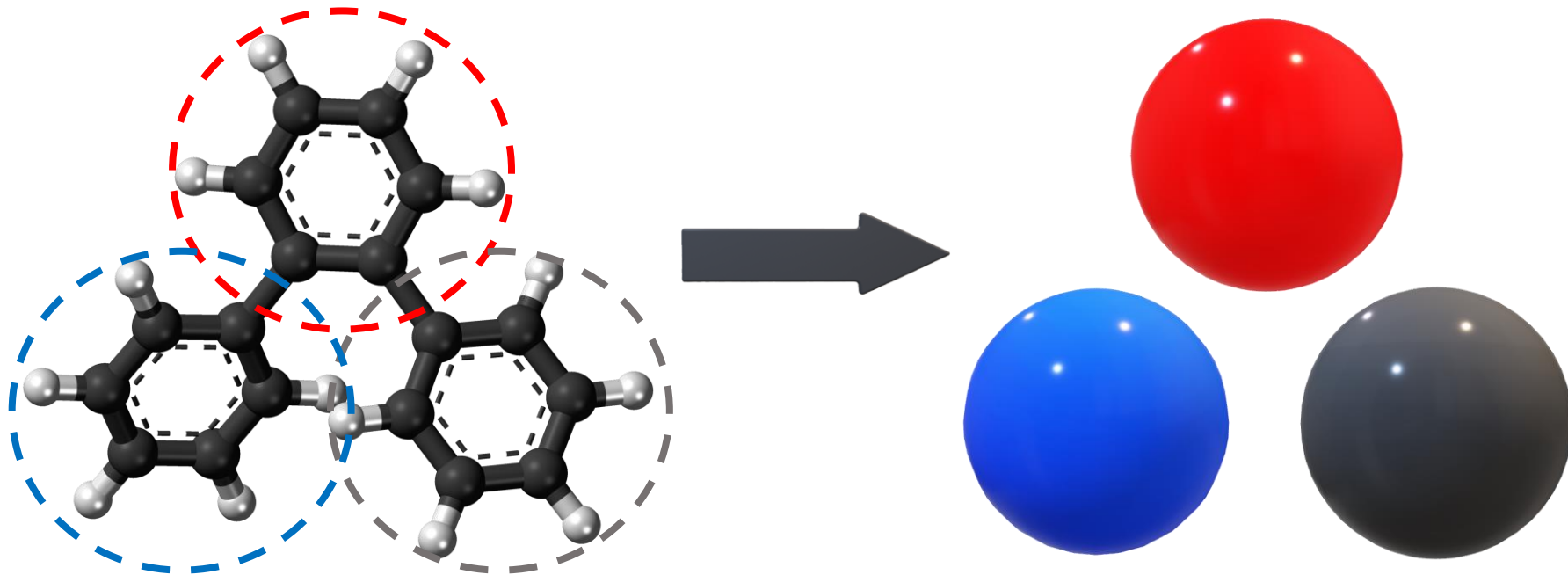
- Coarse-Graining
- Autoencoders
- Coarse-graining Auto-encoders for Molecular Dynamic
- Applicazione del Modello AE ai Polimeri ad Anello

# COARSE-GRAINING

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

La posizione ed il momento di ciascun sito CG vengono definiti rispettivamente come una combinazione lineare delle posizioni e dei momenti degli atomi o molecole che rappresentano.

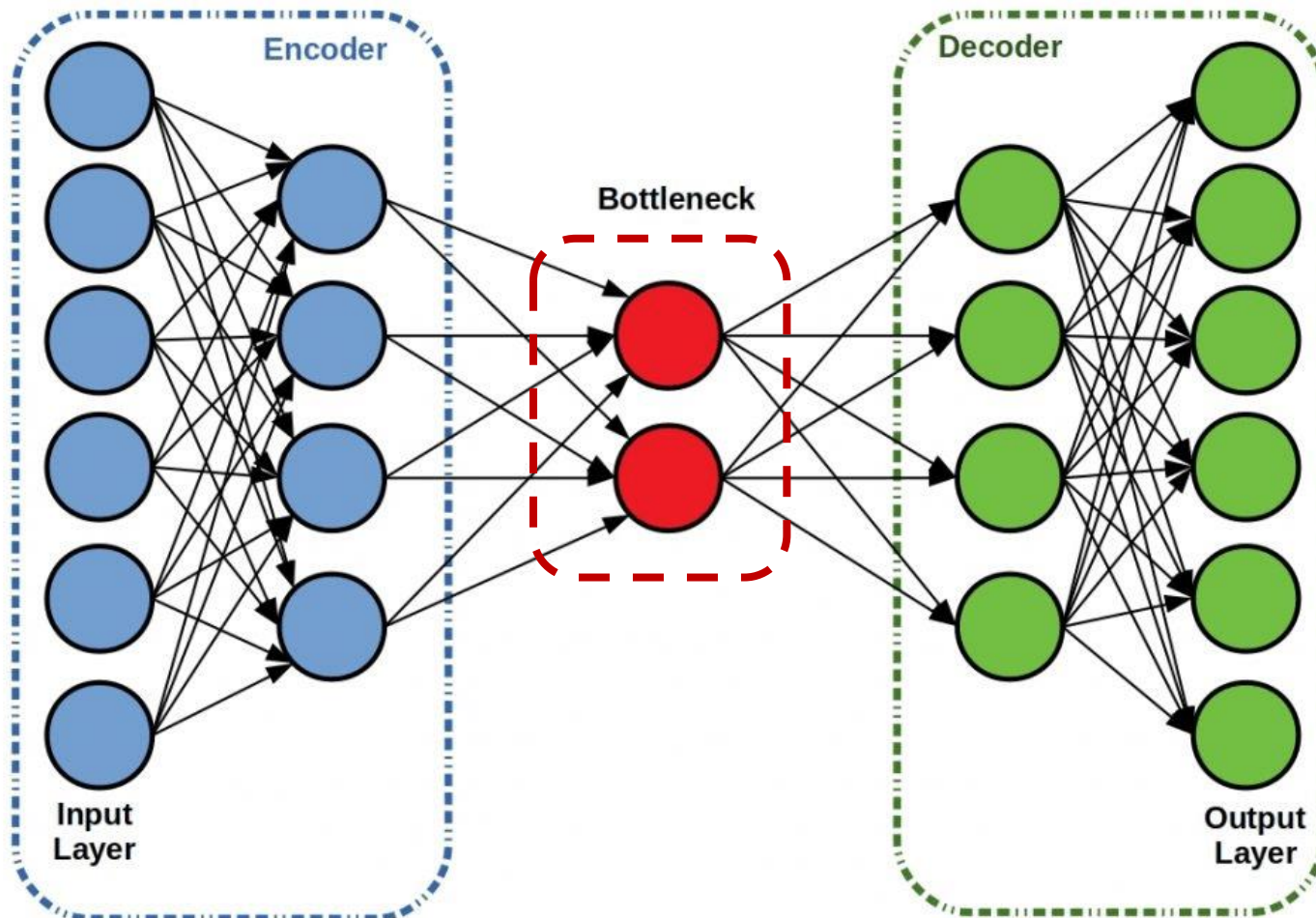
Permette di ridurre il numero di gradi di libertà necessari a descrivere il sistema.



# 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 DYNAMIC

## Obiettivi

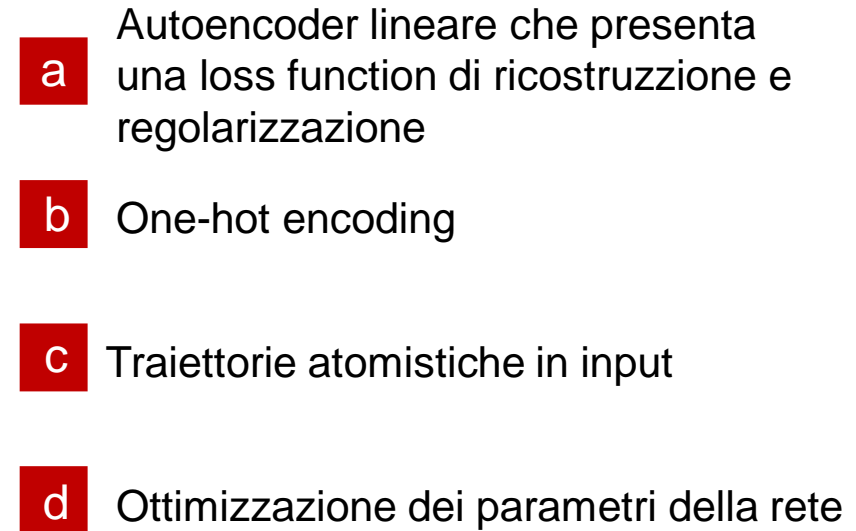
**Trovare una rappresentazione CG**

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.

# Architettura



Autoencoder lineare che presenta una loss function di ricostruzione e regolarizzazione

## One-hot encoding

## Traiettorie atomistiche in input

## Ottimizzazione dei parametri della rete

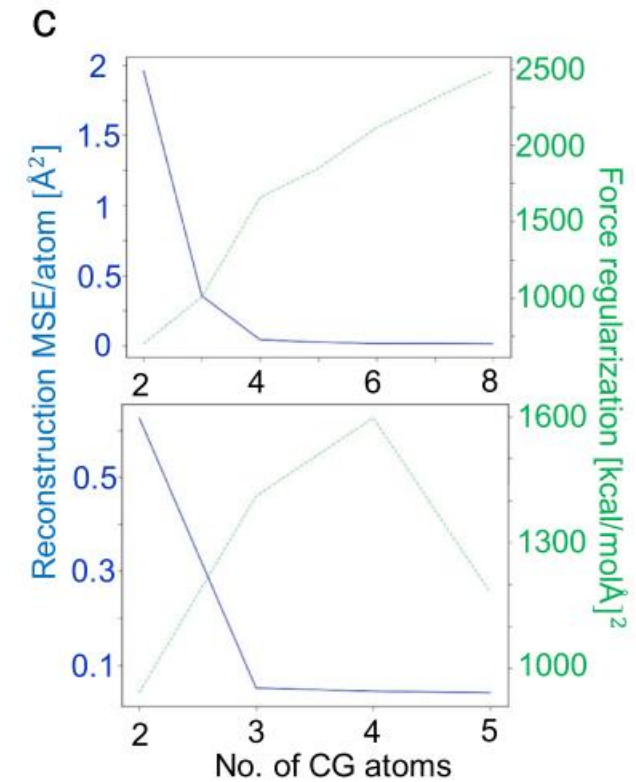
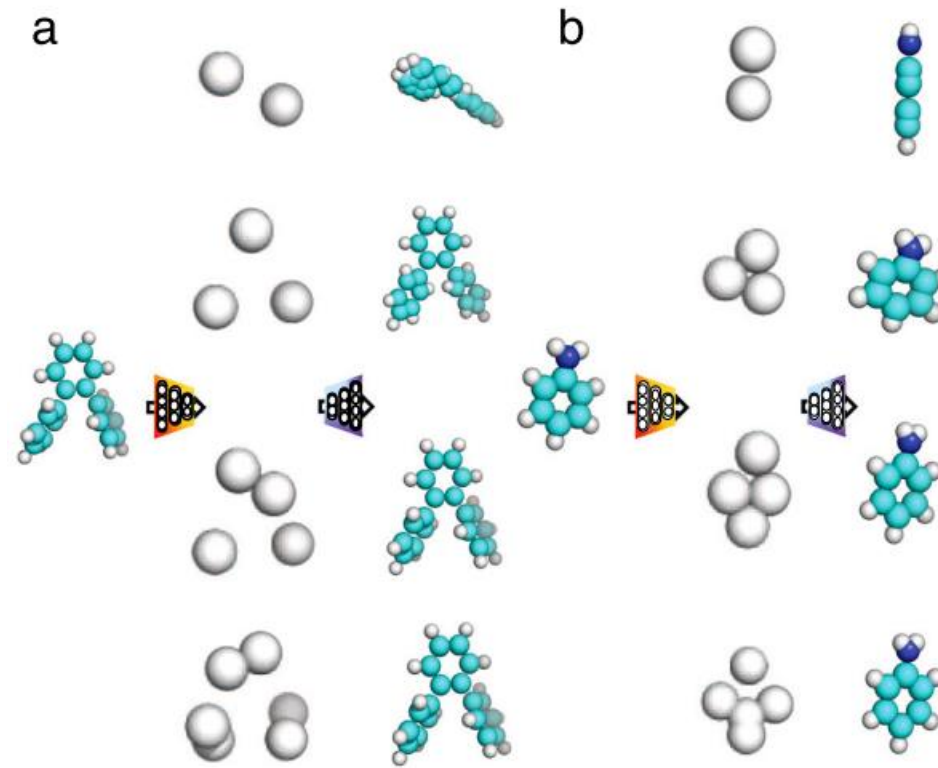
# COARSE-GRAINING AUTO-ENCODERS FOR MOLECULAR DYNAMIC

## Risultati

**a** Econding e Decoding di OTP

**b** Econding e Decoding di anilina

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



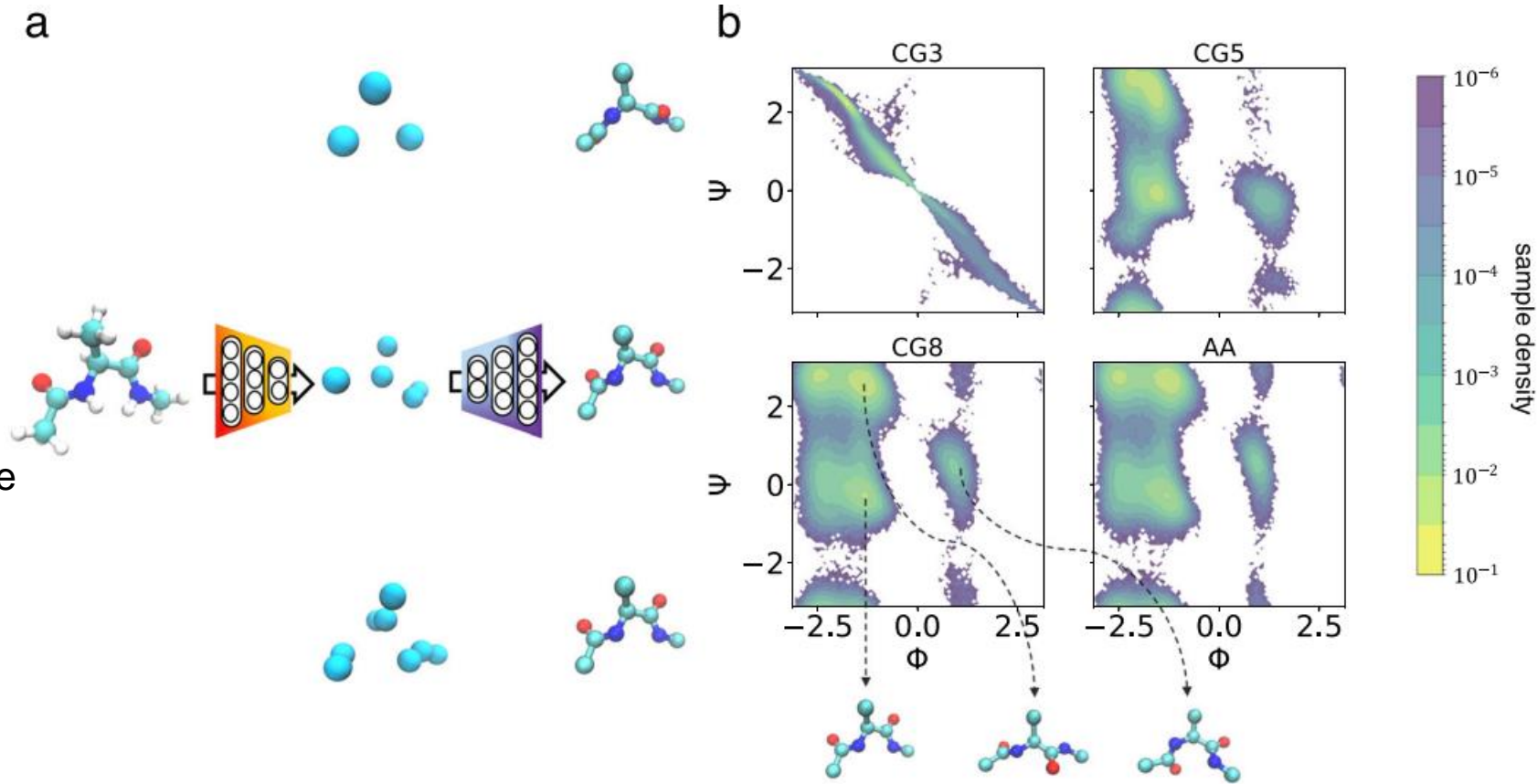


# COARSE-GRAINING AUTO-ENCODERS FOR MOLECULAR DYNAMIC

## Risultati

**a** Econding e Decoding di alanina dipeptide

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





# COARSE-GRAINING AUTO-ENCODERS FOR MOLECULAR DYNAMIC

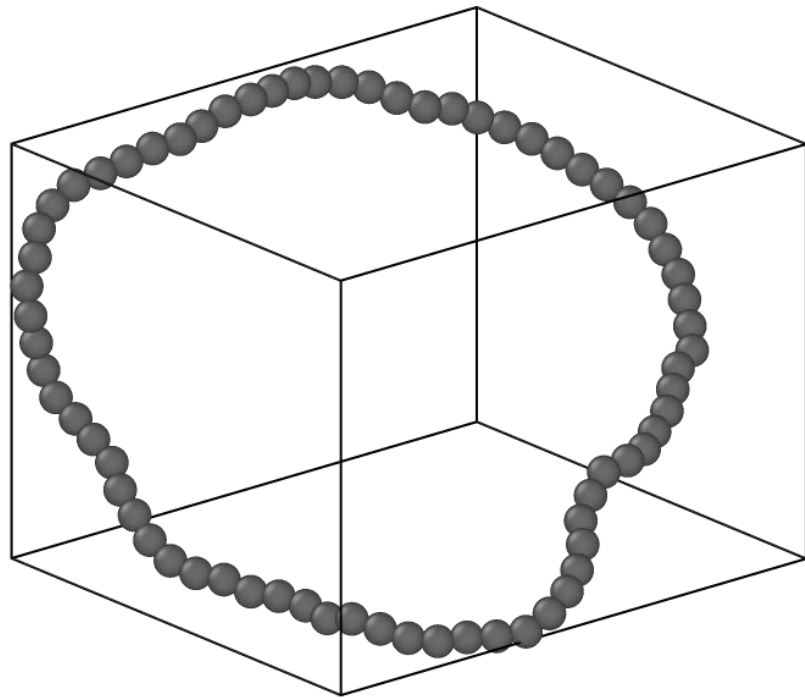
## Discussione

- La rete riesce a catturare le caratteristiche salienti di sistemi all'equilibrio utilizzando un minor numero di gradi di libertà
- Il modello è deterministico, ricostruisce delle strutture atomistiche medie, perdita irreversibile di informazione

# 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

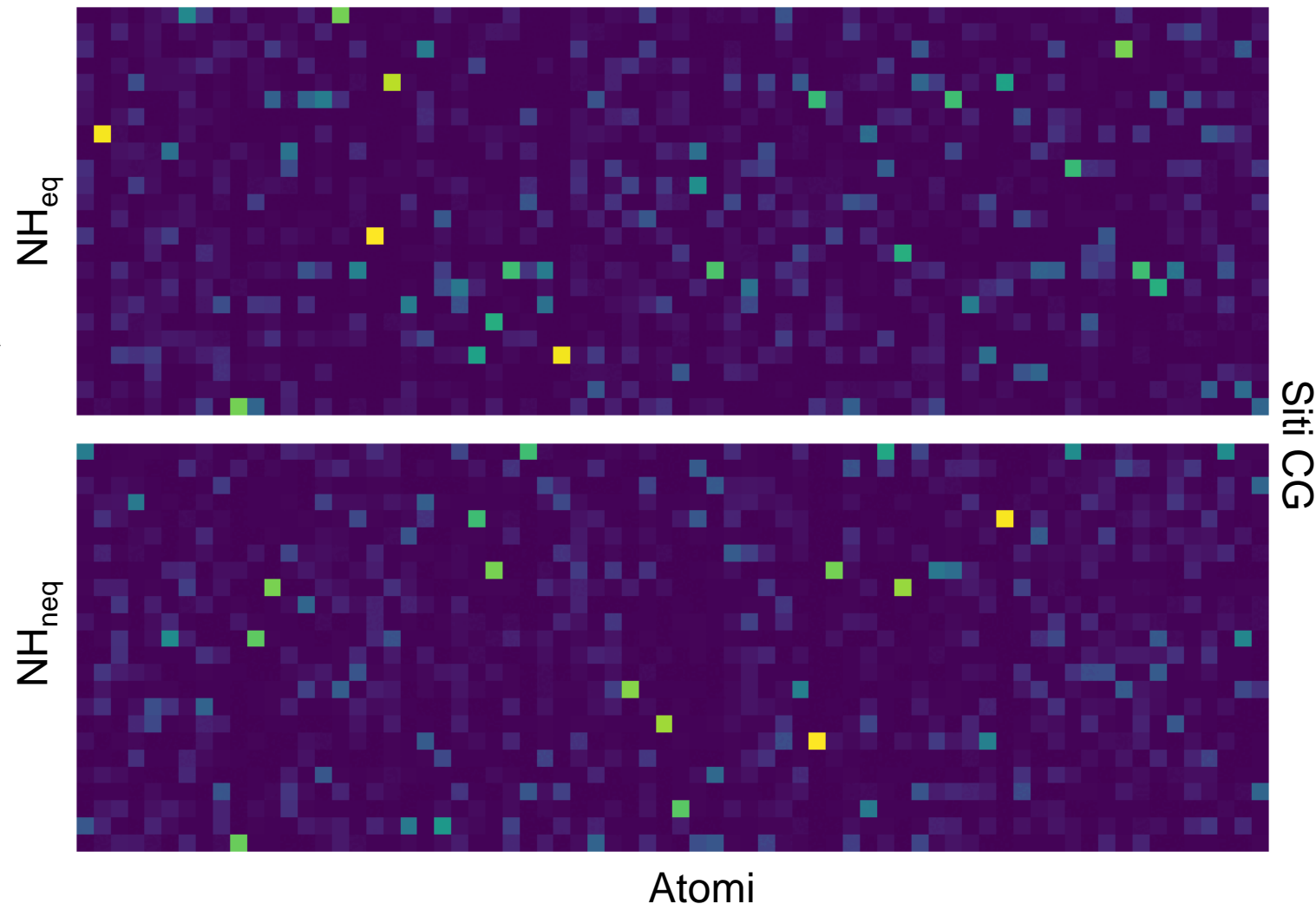
## Training

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

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

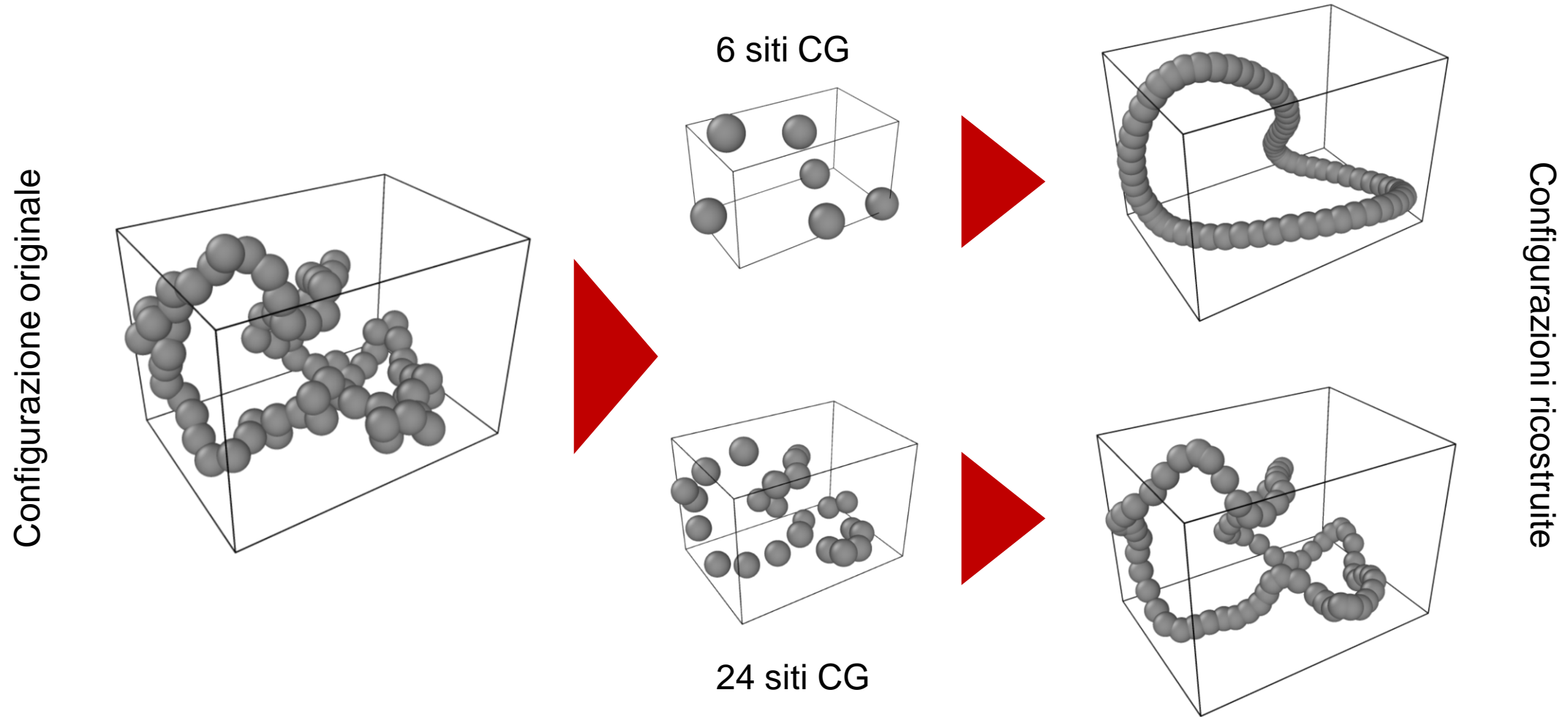
Di lato viene mostrato il processo di ottimizzazione dei parametri della rete avente in input le configurazioni  $NH_{eq}$  e  $NH_{neq}$ .

Ottimizzazione dei parametri della rete



# APPLICAZIONE DEL MODELLO AE AI POLIMERI AD ANELLO

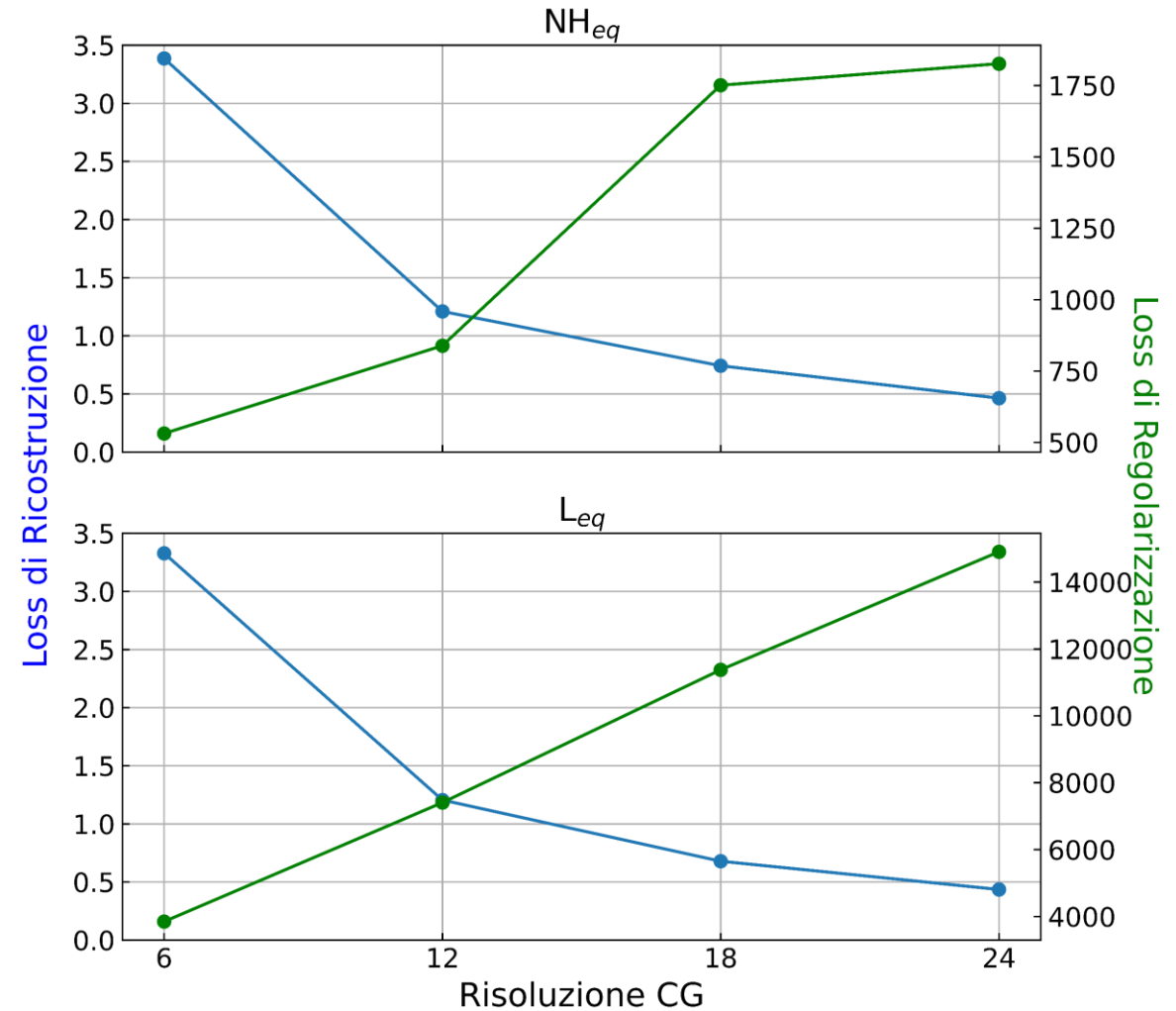
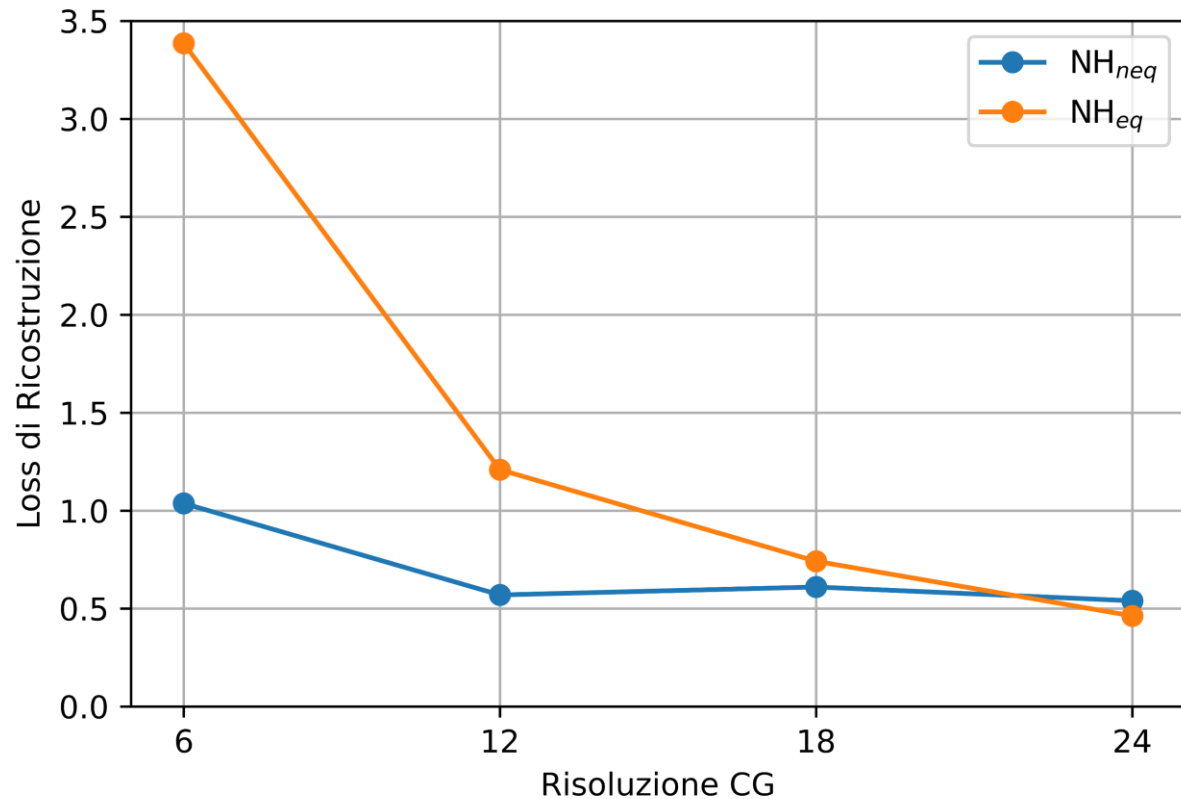
## Risultati



# APPLICAZIONE DEL MODELLO AE AI POLIMERI AD ANELLO

## Risultati

Confronto 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 anche sui polimeri ad anello in condizioni di 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'ATTENTIONE**