

Objectiu del treball:

Entrenar una NN senzilla amb dades de simulacions moleculars per a que sigui capaç de predir el comportament de molècules.

Motivació:

La simulació computacional del comportament de molècules a partir de la solució numèrica de les lleis físiques que les governen és possible però és un procés lent e ineficient degut a la gran complexitat de les equacions. En aquest treball es proposa utilitzar entrenar una NN senzilla per tal d'accelerar aquest procés.

Pla de treball:

- Seleccionar base de dades de simulacions de dinàmica molecular, en cas de falta de dades o que les BD en qüestió no siguin aptes per al projecte construir alguna senzilla desde zero.
- Idealment haurien de ser de interaccions entre molècules molt simples per a poder provar el funcionament base del model.
- Entrenar NN a partir d'aquestes dades per a cada tipus de molècula que es vulgui simular.
- Realitzar les simulacions de cada molècula de configuració instantània paral·lelament a partir de la imatge inicial i construir la següent amb els resultats de cada una de les simulacions.
- Evaluar i comparar resultats.
- Escalar el model a molècules i simulacions de major escala.

Aplicació 1: Simulació completa de MD en funció del Temps

Les NN estan enfocades a simular el següent l'estat de la molècula en la seva totalitat (espacial, temperatura, moviment...) a partir de l'estat anterior.

Aplicació 2: Simulació exclusiva de les forces entre molecules

Tenint en compte que el bottleneck de les simulacions de MD es troba en el càlcul de les energies potencials/forces entre les molècules podria enfocar-se les NN a únicament predir aquestes.