

ResNet을 기반으로 한 Poisson-Boltzmann 방정식의 풀이법

조광현

군산대학교

ResNet based solver for Poisson-Boltzmann equation

Gwanghyun Jo

Kunsan National University

E-mail : gwanghyun@kunsan.ac.kr

요 약

Poisson-Boltzmann은 세포안의 전하의 영향을 기술하는 방정식이며, 생물 등의 분야에서 중요한 역할을 한다. 본 발표에서는 ResNet을 기반으로 한 PBE의 솔루션 예측 방법을 소개 한다. 먼저 FEM을 기반으로 한 방법으로 sample들을 생성한다. 그리고, 세포의 모양과 전하의 위치를 input으로 하고, 전위를 output으로 하는 network를 훈련시킨다.

ABSTRACT

Poisson-Boltzmann equation (PBD), which describes the effects of charges inside cells, plays important roles in various disciplines including biology. In this presentation, we introduce a ResNet based method to predict solution of PBE. First, we generate solutions of PBE based on FEM. Next, we train networks whose input shape includes location of charge and shape of cell and while output shape includes the electronic potential.

키워드

Poisson Boltzmann equation, ResNet, Deep Learning, Finite Element Method, Electronic Potential

I. 서 론

Poisson-Boltzmann 방정식 (이하, PB)은 생물물리 분야에서 등장하는 세포안의 전하가 solute-solvent 도메인의 전위에 끼치는 영향을 기술한 방정식이다. 본 발표에서는 Poisson-Boltzmann 방정식을 딥러닝을 이용하여 푸는 방법을 기술한다. 샘플을 생성하기 위해서 경계함유유한요소법 (Immersed finite element method, IFEM)을 이용하였다. 특히, 샘플을 효율적으로 생성하기 위해서 IFEM 에서의 penalty parameter를 어떻게 정해야 되는지에 대한 고찰이 이루어 졌으며, IFEM으로 발생한 대수 방정식은 algebraic multigrid method (AMG)를 통하여 효율적으로 구하였다.

이러한 방식으로 생성된 샘플들은 ResNet을 기반으로 한 효율적인 neural network를 훈련하기 위하여 사용되었다. Neural network에는 단순히 charge의 위치와 solute-solvent의 interface를 대입하면, electrostatic potential을 계산하는 구조로 만들어 졌

다. 본 발표에서는 neural network의 성능을 보고하려 한다.

II. 방법

II. A. 샘플의 생성

샘플은 [2]에서 소개된, discontinuous bubble immersed finite element method (DB-IFEM)을 사용하여 생성 되었다. DB-IFEM의 아이디어는 불연속한 부분을 discontinuous bubble로 묘사하는 것이다. 또한 DB-IFEM의 장점은 균일 격자 위에서 시뮬레이션이 이루어진다는 것이다. 따라서 DB-IFEM을 통하여 만들어진 solution은 특정 해상도를 가진 image처럼 사용하여 neural network를 학습시킬 수 있다.

II. B. ResNet 기반의 neural network

PB의 해를 예측하기 위하여 ResNet 기반의 neural network를 사용하였다. Skip connection을 갖고 있는 ResNet을 사용하는 이유는 network의 층이 깊기 때문이다. 본 발표에서는 5,000만개 정도의 parameter를 갖고 있는 신경망을 사용하였다. 또한 신경망의 input은 charge의 위치와 세포막의 모양을 각각 1채널, 2채널에 갖고 있는 이미지 형태이다. Output은 electrostatic potential이다.

III. 결과

이러한 방법으로 만들어진 neural network는 다양한 hyperparameter를 갖고 있다. 본 발표에서는 약 5000만개의 parameter를 사용한 neural network의 성능을 보고한다. 정확도의 경우 에러가 0.001이하가 됨으로 상당히 정확하다 할 수 있다. 다만 에러가 solute-solvent 인터페이스 근처에서 크게 등장하였다.

IV. 결론

본 발표에서는 PB를 ResNet을 기반으로 한 neural network로 예측하는 방법을 소개하였다. 정확도는 상당히 높으나, 앞으로의 과제는 신경망의 parameter 수를 줄이는 것이다.

Acknowledgement

이 논문은 NRF (No. 2020R1C1C1A01005396) 지원을 받음.

References

- [1] G. Jo and D. Y. Kwak, "Recent development of immersed FEM for elliptic and elastic interface problems," *Journal of Korean Society for Industrial and Applied Mathematics*, Vol. 23, pp. 65-92, 2019.
- [2] I. Kwon and D. Y. Kwak, "Discontinuous bubble immersed finite element method for Poisson-Boltzmann equation," *Communications in computational physics*, Vol. 25, pp. 928-946, 2019.
- [3] L. Chen, M. J. Holst, and J. Xu "The finite element approximation of the nonlinear Poisson-Boltzmann equation," *SIAM Journal on Numerical Analysis*, Vol. 45, pp. 2298-2320, 2007.

- [4] I. -L. Chern, J. -G. Liu, W. -C. Wang, et al., "Accurate evaluation of electrostatics for macromolecules in solution," *Methods and Applications of Analysis*, Vol. 10, pp. 309-328, 2003.
- [5] M. E. Davis and J. A. McCammon, "Electrostatics in biomolecular structure and dynamics," *Chemical Reviews*, Vol. 90, pp. 509-521, 1990.
- [6] He, et al., "Deep residual learnings for image recognition," in *Proceedings of the IEEE conference on computer vision and pattern recognition*, pp. 770-778, 2016.