

### [Akceptuje](#)

W ramach naszej witryny stosujemy pliki cookies w celu świadczenia państwu usług na najwyższym poziomie, w tym w sposób dostosowany do indywidualnych potrzeb. Korzystanie z witryny bez zmiany ustawień dotyczących cookies oznacza, że będą one zamieszczone w Państwa urządzeniu końcowym. Możecie Państwo dokonać w każdym czasie zmiany ustawień dotyczących cookies. Więcej szczegółów w naszej [Polityce Prywatności](#)

[Portal](#) [Informacje](#) [Katalog firm](#) [Praca](#) [Szkolenia](#) [Wydarzenia](#) [Porównania międzylaboratoryjne](#)  
[Kontakt](#)



**[Laboratoria](#)**  
**[.net](#)**  
**[Innowacje](#)**  
**[Nauka](#)**  
**[Technologie](#)**

[Logowanie](#) [Rejestracja](#) [pl](#)

Newsletter

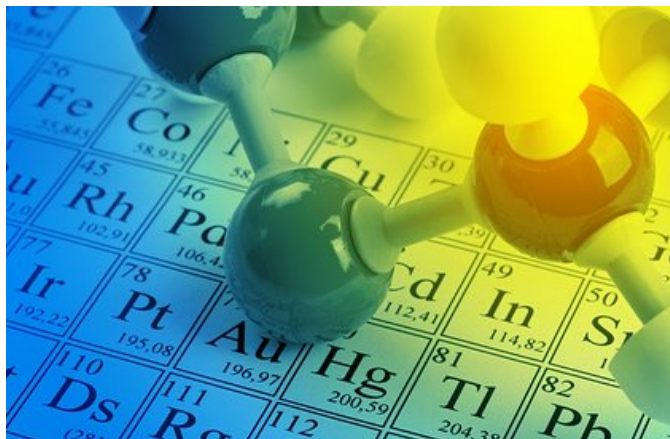
zapisz się



- [Nowe technologie](#)
- [Felieton](#)
- [Tygodnik "Nature"](#)
- [Edukacja](#)
- [Artykuły](#)
- [Przemysł](#)

[Strona główna](#) > [Felieton](#)

## Komputery chemiczne coraz bardziej realne



**Po zastosowaniu odpowiedniej strategii „uczenia”, nawet stosunkowo prosty układ chemiczny może wykonywać nietrywialne operacje. Komputery chemiczne stają się coraz bardziej realne, udowadniają naukowcy z Instytutu Chemii Fizycznej PAN w Warszawie.**

Współczesne komputery do obliczeń wykorzystują sygnały elektroniczne, czyli zjawiska fizyczne związane z przepływem ładunków elektrycznych. Informację można jednak przetwarzać wieloma sposobami. Od pewnego czasu na świecie trwają próby użycia w tym celu sygnałów chemicznych. Powstające układy chemiczne realizują na razie tylko najprostsze operacje logiczne.

W Instytucie Chemii Fizycznej Polskiej Akademii Nauk (IChF PAN) w Warszawie za pomocą symulacji komputerowych wykazano, że nawet nieskomplikowane i już dziś łatwe do wykonania zestawy kropeł, w których zachodzą oscylujące reakcje chemiczne, mogą przetwarzać informację w użyteczny sposób, np. z dużą dokładnością wykrywać kształt określonego obiektu trójwymiarowego lub poprawnie klasyfikować komórki nowotworowe na łagodne i złośliwe.

"Wiele prac prowadzonych obecnie w laboratoriach koncentruje się wokół budowy chemicznych odpowiedników standardowych bramek logicznych. My podeszliśmy do zagadnienia inaczej" - mówi dr inż. Konrad Giżyński z IChF PAN. "Badamy układy kilkunastu-kilkudziesięciu kropeł, w których propagują się sygnały chemiczne i każdy traktujemy jako całość, jako pewnego rodzaju sieć neuronową. Okazuje się, że takie sieci, nawet bardzo proste, już po krótkim szkoleniu potrafią sobie dobrze radzić z dość wyrafinowanymi zagadnieniami. Na przykład nasz najnowszy układ bez większego problemu wykrywa kształt sfery w zbiorze współrzędnych przestrzennych  $x, y, z$ " - wyjaśnia.

Jak informuje IChF PAN w przesłanym PAP komunikacie, układy badane w Instytucie działają dzięki reakcji Biełousowa-Żabotyńskiego zachodzącej w poszczególnych kroplach. Reakcja ta ma charakter cykliczny: po zakończeniu jednego cyklu w roztworze odtwarzają się reagenty niezbędne do rozpoczęcia cyklu kolejnego. Nim reakcja ustanie, kropla zazwyczaj wykonuje od kilkudziesięciu do kilkuset oscylacji. Przebieg reakcji jest przy tym łatwy do zaobserwowania, ponieważ będąca jej katalizatorem ferriina zmienia swój kolor w trakcie cyklu. W płytkich naczyniach z cienką warstwą roztworu efekt jest spektakularny: w cieczy pojawiają się rozchodzące się na wszystkie strony barwne pasy - fronty chemiczne. W kroplach fronty także można zobaczyć, jednak w praktyce o fazie cyklu świadczy po prostu kolor kropli: gdy cykl się zaczyna, kropla gwałtownie się „wzbudza” i zmienia kolor na niebieski, po czym stopniowo powraca do stanu początkowego, w którym ma kolor czerwony.

"Podstawą działania naszych układów jest wzajemna komunikacja między kroplami: gdy krople się stykają, wtedy pobudzenia chemiczne mogą się przenosić z kropli do kropli. Innymi słowy, jedna kropla może wzbudzać reakcję w drugiej. Istotny przy tym jest fakt, że kropli wzbudzonej nie można

od razu ponownie wzbudzić. Mówiąc nieco kolokwialnie, przed kolejnym wzbudzeniem musi ona chwilę +odpocząć+, żeby potem wrócić do stanu pierwotnego” - tłumaczy dr Giżyński.

Aby układ przetworzył informację - tłumaczą specjaliści IChF PAN - trzeba ją do niego wprowadzić, a po przetworzeniu odczytać. Ważna jest także możliwość kontrolowanego modyfikowania sposobu, w jaki układ przetwarza informację. Do tych zadań badacze z IChF PAN używali światła oraz dodatkowego (poza ferrioiną) katalizatora: rutenu. Reakcja Bielousowa-Żabotyńskiego katalizowana rutenem ma bowiem ważną cechę: jest inhibitowana światłem niebieskim, co oznacza, że przy intensywnym oświetleniu krople przestają oscylować. Zmieniając oświetlenie konkretnej kropli można więc decydować, czy ma ona uczestniczyć w przetwarzaniu informacji czy nie, oraz wzbudzać ją według dowolnie dobranego wzorca. W przypadku kropeł służących do wprowadzania informacji, dłuższy czas oświetlania można wtedy interpretować np. jako większą wartość wprowadzanej współrzędnej przestrzennej.

"W symulacjach, w których warszawscy naukowcy poszukiwali metod detekcji kształtu sfery, rozpatrywano sieci kwadratowe złożone z 2x2, 3x3, 4x4 i 5x5 kropeł. Aby odwzorować rzeczywiste tempo reakcji chemicznych przyjmowano, że kropla w stanie wzbudzonym spędza jedną sekundę, a do stanu, w którym może być pobudzona ponownie, powraca po dziesięciu sekundach" - czytamy przesłanym PAP komunikacie.

Przed rozpoczęciem procesu uczenia badacze musieli jeszcze stworzyć odpowiedni „podręcznik” z opisem sfery. W tym celu wygenerowano przypadkowy zestaw punktów, którym przypisano wartość 1, gdy dany punkt należał do sfery, albo wartość 0, gdy punkt leżał poza nią. Tak przygotowana baza danych stała się podstawą procesu nauki, w którym każda ze składowych punktu (x, y, z) decydowała o czasie oświetlenia innej kropli wejściowej.

Aby wytrenować układ kropeł pod kątem wykrywania kształtu sfery, badacze z IChF PAN użyli algorytmów ewolucyjnych. Proces uczenia zaczynał się od losowego wygenerowania 30 wzorców oświetlenia układu, w których pewne krople służyły do wprowadzania informacji, a pozostałe pozostawały nieaktywne przez czas będący przedmiotem optymalizacji. Po przetworzeniu przez układ kropli całej bazy danych sprawdzano, dla której kropli ewolucja jest najlepiej skorelowana z oczekiwanym wynikiem. Kroplę tę traktowano jako wyjściową. Z tak otrzymanej pierwszej generacji układów wybierano kilka najlepszych, „namnażano” je wprowadzając po drodze niewielkie zmiany („mutacje”) w sposobach oświetlenia i cykl nauki rozpoczynano od początku. Proces uczenia kontynuowano przez 500 generacji.

"Najlepsze wyniki osiągnęliśmy dla układu kropeł 4x4. Wykazywał on największą skuteczność w wykrywaniu kształtu sfery, na poziomie 85 proc. Na dodatek nabywał tę umiejętność najszybciej, bo w ciągu zaledwie 150 generacji. Układ 5x5 być może mógłby być lepszy, ale żeby to sprawdzić, proces uczenia należałoby wydłużyć ponad 500 generacji” - mówi dr Giżyński.

Układy kropeł nie interpretują napływających danych, jedynie szukają między nimi korelacji („kształtów”) podobnych do tej, w której znajdowaniu je wytrenowano. Zamiast współrzędnych przestrzennych punktów z kształtem sfery można więc do nich wprowadzać dane o innym znaczeniu, np. powiązane z różnymi cechami komórek nowotworowych. Układ mógłby wówczas poszukiwać „kształtu” danych odpowiadającego np. nowotworom łagodnym bądź złośliwym.

"Rzeczywiście, w jednej z naszych niedawnych publikacji, zrealizowanych we współpracy z kolegami z Uniwersytetu w Jenie, pokazaliśmy, że układ 5x5 kropeł potrafił klasyfikować komórki nowotworowe z medycznej bazy danych CANCER z precyzją sięgającą 97 proc. Za pomocą klasycznych komputerów osiąga się lepsze wyniki, niemniej są też na nich klasyfikatory działające mniej wydajnie. Zatem chemiczne przetwarzanie informacji, choć wciąż mocno niedoskonałe,

zaczyna oferować coraz ciekawsze i bardziej użyteczne możliwości” - podsumowuje dr Giżyński.

*PAP - Nauka w Polsce*

Źródło: [www.naukawpolsce.pap.pl](http://www.naukawpolsce.pap.pl)

<http://laboratoria.net/felieton/26929.html>

**Informacje dnia:** [PCI Days 2025 - Targi dla Przemysłu Farmaceutycznego i Kosmetycznego](#) [Nie tylko szczepienia przeciw HPV ważne w prewencji raka szyjki macicy](#) [Jak skutecznie poradzić sobie z bezsennością](#) [Naukowcy stworzyli beton z dodatkiem wody słonej zamiast słodkiej](#) [Nie trzymajmy dzieci pod kloszem z tematem śmierci](#) [Dużo światła w nocy może prowadzić do przedwczesnej śmierci](#) [PCI Days 2025 - Targi dla Przemysłu Farmaceutycznego i Kosmetycznego](#) [Nie tylko szczepienia przeciw HPV ważne w prewencji raka szyjki macicy](#) [Jak skutecznie poradzić sobie z bezsennością](#) [Naukowcy stworzyli beton z dodatkiem wody słonej zamiast słodkiej](#) [Nie trzymajmy dzieci pod kloszem z tematem śmierci](#) [Dużo światła w nocy może prowadzić do przedwczesnej śmierci](#) [PCI Days 2025 - Targi dla Przemysłu Farmaceutycznego i Kosmetycznego](#) [Nie tylko szczepienia przeciw HPV ważne w prewencji raka szyjki macicy](#) [Jak skutecznie poradzić sobie z bezsennością](#) [Naukowcy stworzyli beton z dodatkiem wody słonej zamiast słodkiej](#) [Nie trzymajmy dzieci pod kloszem z tematem śmierci](#) [Dużo światła w nocy może prowadzić do przedwczesnej śmierci](#)

**Partnerzy**