

[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

Naukowy styl życia

Nauka i biznes

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

[Strona główna](#) > [Informacje](#)

Sztuczna inteligencja uczy się przewidywać dynamikę cząsteczek

Symulacje ruchu atomów należą do podstawowych narzędzi współczesnej chemii, fizyki i nauki o materiałach. Są jednak bardzo kosztowne obliczeniowo: komputer musi śledzić

zmiany położenia atomów krok po kroku, a tych kroków bywają miliony. Nowy model sztucznej inteligencji znacząco poprawia efektywność takich symulacji, przewidując od razu, jak będzie wyglądał cały fragment ruchu cząsteczek.

Od lat badacze próbują coraz dokładniej opisywać zachowanie materii w skali atomowej. Gdy chemik chce zrozumieć, jak drga cząsteczka, jak zmienia jej kształt, jak przebiega reakcja albo jak układają się atomy w sieci krystalicznej, sięga po symulacje dynamiki molekularnej. To metoda bardzo ważna, ale zarazem kosztowna. Komputer musi przesuwać układ w czasie bardzo małymi krokami i po każdym kroku obliczać siły działające na atomy i ich pozycje. To trochę tak, jakby planując trasę samochodem trzeba było podzielić ją na etapy o długości jednego metra.

W czasopiśmie naukowym *Journal of Chemical Theory and Computation* (doi: 10.1021/acs.jctc.5c01689) międzynarodowy zespół naukowy Pavlo O. Drala z Instytutu Fizyki na Wydziale Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej Uniwersytetu Mikołaja Kopernika w Toruniu proponuje rozwiązanie tego problemu. Model nazwany MDtrajNet ma przewidywać położenia atomów bezpośrednio dla zadanego momentu w przyszłości - z pominięciem zwykłego, żmudnego liczenia wszystkich etapów pośrednich. To próba zmiany całej logiki obliczeń z wykorzystaniem algorytmów sztucznej inteligencji. Dotąd uczenie maszynowe często służyło w chemii do szybszego obliczania sił między atomami. Było to dużym usprawnieniem obliczeń, ale sam przebieg symulacji pozostawał sekwencyjny: krok, obliczenie, krok, obliczenie. Teraz badacze próbują przeskoczyć to podstawowe ograniczenie i ominąć samą potrzebę ciągłego wykonywania kolejnych kroków.

Żeby to osiągnąć, zespół opracował architekturę łączącą dwa bardzo ważne kierunki rozwoju sztucznej inteligencji. Pierwszy to modele uwzględniające symetrię przestrzenną, czyli takie, które rozumieją, że cząsteczka pozostaje tą samą cząsteczką także wtedy, gdy ją obrócić lub przesunąć. Drugi to architektura typu transformer, znana szerzej z modeli językowych, ale coraz częściej stosowana także w naukach ścisłych. W tym przypadku pomaga ona analizować wzajemne zależności między atomami. Model dostaje informację o typach atomów, ich początkowych położeniach, prędkościach i czasie, dla którego ma przygotować przewidywanie i na tej podstawie wyznacza przysłą konfigurację układu.

Naukowcy zbudowali model bazowy, nazwany MDtrajNet-1 i trenowali go na zbiorze danych obejmującym 173 układy cząsteczkowe, zawierające od dwóch do dziewięciu atomów. Nie chodziło o nauczenie modelu jednej konkretnej cząsteczki, lecz o przygotowanie narzędzia, które da się przenosić między różnymi układami chemicznymi. Osiągnięto blisko stukrotne przyspieszenie obliczeń wobec klasycznych symulacji opartych na uczeniu maszynowym, trenowanych na tych samych danych. Przy tym algorytm nie tracił na dokładności. W wielu testach model dawał trajektorie bardziej zgodne z danymi odniesienia niż porównywane metody. To kluczowe, aby zachować sens fizyczny i chemiczny symulacji.

Model generował stabilne trajektorie nie tylko dla cząsteczek znanych z procesu trenowania, lecz także dla części układów wcześniej niewidzianych. Co więcej badacze pokazali, że można go dostroić do bardziej złożonych przypadków. Jednym z testów był alaninowy dipeptyd, czyli klasyczny układ modelowy w chemii obliczeniowej i biofizyce. Model dobrze odtworzył najważniejsze obszary przestrzeni konformacyjnej, a więc różne typowe ułożenia cząsteczki. To może mieć znaczenie dla projektowania leków, nowych materiałów, katalizatorów czy baterii.

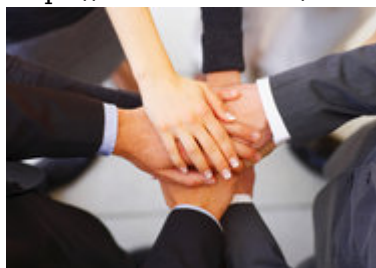
Sukcesy te nie oznaczają, że algorytm jest ukończony. Dzisiejsza wersja modelu była trenowana na stosunkowo niewielkim fragmencie przestrzeni chemicznej. Obejmuje raczej małe układy, a nie pełne bogactwo rzeczywistych problemów spotykanych w chemii materiałów czy biologii. Zdarzały się też nieudane trajektorie, zwłaszcza dla przypadków słabo reprezentowanych w danych treningowych.

Niemniej wyniki wyraźnie wskazują, że szybsze obliczenia dynamiki molekularnej są możliwe bez utraty precyzji i poprawności.

W debacie o sztucznej inteligencji często mówi się o zastępowaniu ludzi lub automatyzacji gotowych czynności. Tymczasem w naukach ścisłych coraz ciekawsze bywają sytuacje, w których AI nie tyle przejmuje znaną procedurę, ile zmienia sam sposób stawiania problemu. W tych badaniach widać to bardzo dobrze. Zamiast zwiększać szybkość układów elektronicznych i komputerów wykonujących obliczenia w klasyczny sposób, naukowcy proponują, by model AI uczył się bezpośrednio przebiegu ruchu atomów, i w ten sposób poszukiwał sposobów zwiększenia efektywności samych algorytmów. To istotne przesunięcie akcentu. Chemia obliczeniowa i fizyka molekularna wchodzi w etap, w którym sztuczna inteligencja zaczyna współtworzyć nowe style uprawiania nauki. Nie zastępuje praw fizyki, ale pomaga znajdować krótszą drogę do ich praktycznego wykorzystania.

Źródło: pap.pl

<https://laboratoria.net/aktualnosci/32814.html>



12-05-2026

[Ruszyła IV edycja konkursu Pomosty Przyszłości](#)

Najlepsze pomysły łączące naukę z biznesem.



12-05-2026

[Kleszcz to tylko pośrednik](#)

Krętki Borrelia to częściowo „prezent” od gryzoni i ptaków



12-05-2026

[Jak rower zmienił świat](#)

Od drewnianej „maszyny biegowej” do emancypacji robotników i kobiet



12-05-2026

[Polacy opracowują aparaturę dla teleskopów europejskiej misji...](#)

Utworzą obserwatorium do badania fal grawitacyjnych.



12-05-2026

[Badanie: portale społecznościowe nie chronią przed samotnością](#)

Samotność ma liczne negatywne skutki zdrowotne.



12-05-2026

[Norowirusy - biegunka brudnych rąk](#)

Przenoszone drogą pokarmową norowirusy wywołują gwałtowne wymioty.



12-05-2026

[Rak nie jest wskazaniem do przedwczesnego rozwiązania ciąży](#)

W czasie ciąży można bezpiecznie prowadzić odpowiednie leczenie onkologiczne.



12-05-2026

[Zakażenia w chirurgii to coraz większy problem](#)

Konieczne jest wdrożenie skutecznego systemu opieki nad pacjentem.

Informacje dnia: [Ruszyła IV edycja konkursu Pomosty Przyszłości Kleszcz to tylko pośrednik Jak rower zmienił świat Polacy opracowują aparaturę dla teleskopów europejskiej misji kosmicznej](#) [Badanie: portale społecznościowe nie chronią przed samotnością](#) [Norowirusy - biegunka brudnych rąk](#) [Ruszyła IV edycja konkursu Pomosty Przyszłości Kleszcz to tylko pośrednik Jak rower zmienił świat Polacy opracowują aparaturę dla teleskopów europejskiej misji kosmicznej](#) [Badanie: portale społecznościowe nie chronią przed samotnością](#) [Norowirusy - biegunka brudnych rąk](#) [Ruszyła IV](#)

[edycja konkursu Pomosty Przyszłości](#) [Kleszcz to tylko pośrednik](#) [Jak rower zmienił świat](#) [Polacy opracowują aparaturę dla teleskopów europejskiej misji kosmicznej](#) [Badanie: portale społecznościowe nie chronią przed samotnością](#) [Norowirusy - biegunka brudnych rąk](#)

Partnerzy