

W kierunku dokładnych uniwersalnych potencjałów uczenia maszynowego do symulacji elektronowych stanów wzbudzonych

Streszczenie popularnonaukowe

Mikołaj Martyka¹

¹Wydział Chemii, Uniwersytet Warszawski

Gdy cząsteczki pochłaniają światło — na przykład światło słoneczne lub laserowe — energia ta może przenieść cząsteczkę ze stanu podstawowego do elektronowego stanu wzbudzonego. Stany wzbudzone odgrywają kluczową rolę w takich zjawiskach jak działanie paneli słonecznych, postrzeganie światła przez ludzkie oko, terapia fotodynamiczna w leczeniu nowotworów czy zmiana właściwości materiałów pod wpływem światła. Zrozumienie i symulacja stanów wzbudzonych ma zatem fundamentalne znaczenie dla rozwoju odnawialnych źródeł energii, elektroniki molekularnej oraz nowoczesnych materiałów i leków.

Niestety, dokładne symulacje stanów wzbudzonych z użyciem tradycyjnych metod chemii kwantowej są bardzo czasochłonne i kosztowne. W praktyce ograniczają się one do bardzo małych układów molekularnych. Celem niniejszego projektu jest przełamanie tych barier poprzez zastosowanie **uczenia maszynowego** do tworzenia modeli zdolnych do przewidywania właściwości stanów wzbudzonych *o rzędy wielkości szybciej* niż klasyczne metody, przy zachowaniu wysokiej dokładności.

Choć uczenie maszynowe już zrewolucjonizowało symulacje cząsteczek w stanie podstawowym, zastosowanie go do stanów wzbudzonych jest znacznie trudniejsze. Wynika to z ich złożoności i nieregularności: wiele powierzchni energii oddziałuje i przecina się w trudny do przewidzenia sposób. Pomimo tych trudności nasz zespół opracował niedawno **OMNI-P2x** — pierwszy na świecie uniwersalny potencjał uczony maszynowo (MLP, ang. *machine learning potential*) dla stanów wzbudzonych. Model ten pozwala na szybkie i dokładne przewidywanie widm UV-Vis oraz geometrii cząsteczek w stanie wzbudzonym i może być dostosowany do symulacji reakcji fotochemicznych.

W ramach tego projektu podejmiemy kolejne kroki w kierunku uczynienia **uniwersalnych modeli MLP** niezawodnym narzędziem fotochemii teoretycznej. Nasze cele to:

- Wygenerowanie dużych, wysokiej jakości zbiorów danych dostosowanych do uczenia modeli stanów wzbudzonych;
- Opracowanie zaawansowanych architektur sieci neuronowych, uwzględniających symetrie molekularne i informację o stanie elektronowym;
- Zastosowanie techniki *delta learning*, która polega na korygowaniu szybkich, przybliżonych metod za pomocą uczenia maszynowego, w celu osiągnięcia jakości droższych, dokładniejszych metod ;
- Opracowanie procedur dostrajania modeli uniwersalnych do konkretnych zadań, takich jak symulacje reakcji fotochemicznych w czasie rzeczywistym;
- Zastosowanie modeli w praktyce: do projektowania cząsteczek do magazynowania energii słonecznej (systemy MOST).

Efektem projektu będzie nowa generacja modeli opartych na sztucznej inteligencji, które umożliwią badaczom symulowanie oddziaływań światła z materią szybciej, bez konieczności korzystania z superkomputerów czy zaawansowanej wiedzy specjalistycznej. Projekt ten może przyspieszyć odkrycia w chemii, nauce o materiałach i fotobiologii, wspierając rozwój technologii przyszłości i zrównoważonej energetyki.