
机器学习模型实现稳定分子动力学模拟

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/39214.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

机器学习模型实现稳定分子动力学模拟

。科技日报北京4月7日电（记者张梦然）发表于最新一期《通信化学》的研究称，科学家开发出一种具有超高稳健性的机器学习模型，能够在极端温度等苛刻条件下，实现前所未有的稳定分子动力学模拟。这项突破标志着机器学习驱动分子模拟向真正可靠、实用的方向迈出了关键一步，有望大幅提升在药物研发、新材料设计和绿色化学等领域的计算模拟可靠性，为加速科学发现与技术创新铺路。



图片来源：AI生成

长期以来，利用机器学习势函数来近似模拟分子系统的量子力学行为，已成为计算化学的重要工具。然而，绝大多数现有模型存在一个根本性弱点：当模拟中的分子因受热、运动或结构扭曲而进入高能状态时，数值会不稳定，导致模拟崩溃，原子出现不合理的聚集或飞散，即模拟中的分子“解体”。这一缺陷使得在真实条件下进行长时间、可靠的分子动力学模拟面临巨大障碍。

英国曼彻斯特大学团队通过将深刻的物理学原理深度嵌入机器学习模型的框架，成功解决了这一难题。他们构建的新模型基于一种“高斯过程回归法”，核心创新在于让模型从根本上“理解”并遵从原子在现实世界中的相互作用规律。

团队依据量子力学规则，为模型提供了关于原子间相互作用的详细物理知识作为训练基础。这使

得AI在预测原子运动时，能够做出更符合物理真实的判断。研究中的一个关键发现是，一个看似微小的数学组件——“先验均值函数”的选择，对模型的整体稳定性具有决定性影响。正确设置该函数，相当于为模型提供了一个符合物理规律的“起点”或内在约束。

借助这一设定，即使处在分子被极度拉伸、加热或剧烈扰动的极端条件下，模型也能自发地阻止崩溃，维持长时间稳定运行。

与传统方法相比，新模型展现出了卓越的稳健性。团队通过总计50次、每次持续10纳秒的独立模拟（累计0.5微秒的稳定模拟时间），验证了模型的可靠性。这一时长指标对于机器学习力场而言是一个重要里程碑。

测试显示，即使是阿司匹林、丝氨酸和甘氨酸等本身结构柔性很强的分子，在整个模拟过程中也始终保持稳定，未发生崩溃。

这项成果不仅解决了该领域一个长期存在的稳定性瓶颈，也为在更接近真实工业与生物条件的场景中，利用计算手段加速科学发现与技术创新奠定了坚实基础。

作者：张梦然 来源：科技日报

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](https://www.iikx.com)转发