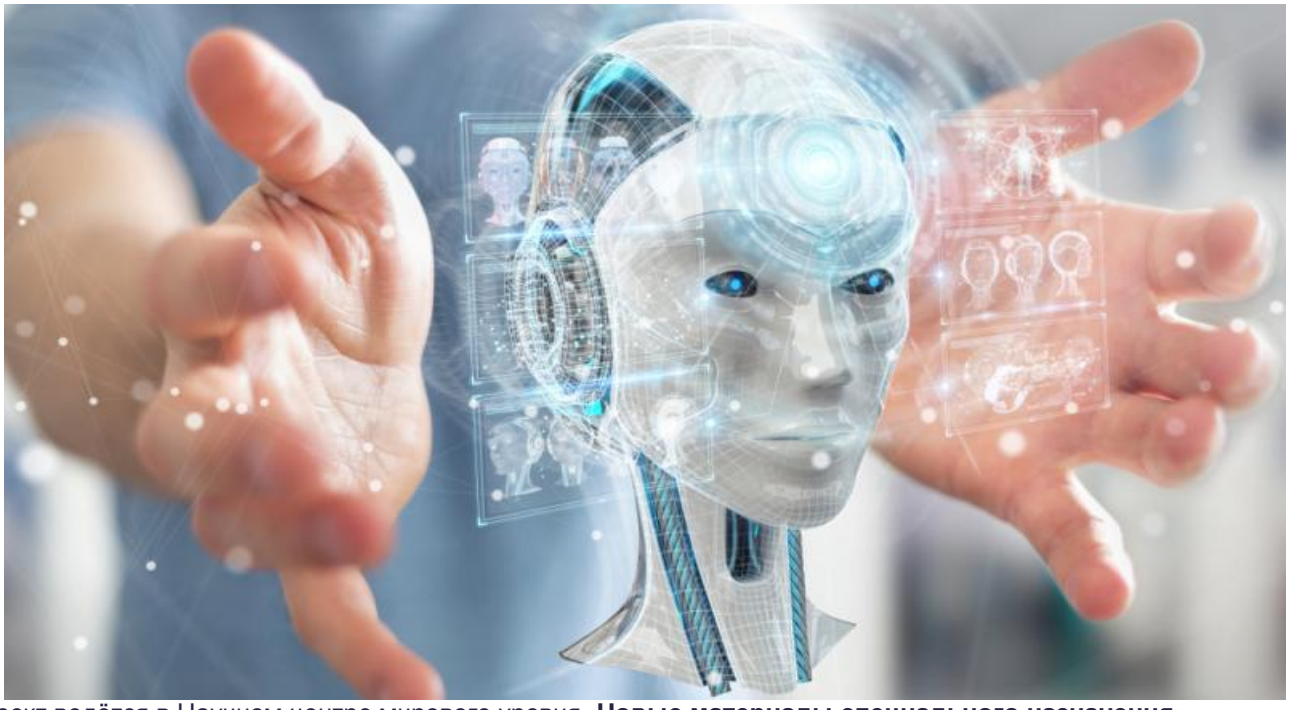
Автор: Андрей Тихонов © Babr24.com НАУКА И ТЕХНОЛОГИИ, ОБРАЗОВАНИЕ, ТОМСК 63
19.11.2026, 23:47

Учёные ТГУ: ИИ для ускорения поиска материалов и новый способ предсказания об астероидах

В Томском государственном университете сразу две разработки демонстрируют, как новые вычислительные методы меняют подход к задачам, которые традиционно требуют огромных затрат времени и ресурсов. Речь идёт не только о создании искусственного интеллекта для поиска новых энергетических материалов, но и о новом способе оценки астероидной опасности.

ИИ вместо слепого перебора

Разработка новых энергоёмких соединений обычно растягивается на долгие годы. Исследователи синтезируют вещества в лаборатории, проверяют их характеристики, а затем повторяют цикл до тех пор, пока не найдут подходящий вариант. Учёные ТГУ предлагают дополнить этот процесс компьютерной оценкой, чтобы эксперименты сразу показывали наиболее перспективные варианты.



Проект ведётся в Научном центре мирового уровня **«Новые материалы специального назначения»**. Младший научный сотрудник лаборатории искусственного интеллекта в химии и материаловедении **Леонид Кузнецов** собирает базу данных для обучения новой ИИ-модели: в неё входят опубликованные экспериментальные и расчётные сведения, а также результаты исследований соединений с недостаточно изученными энергетическими свойствами.



Ключевая идея — научить нейросеть работать в двух направлениях. В «прямой» задаче модели показывают структуру вещества и просят предсказать его характеристики. В «обратной» — задают желаемые свойства, а ИИ предлагает структуры, которых ещё не существует. Предложенные варианты проходят последовательные проверки, чтобы отсеять некорректные соединения и выбрать кандидатов для дальнейших расчётов и экспериментов.

Для предварительных оценок используется метод атомных вкладов: каждому атому в соединении приписывается вклад в зависимости от типа и окружения, а сумма этих вкладов с поправками даёт приближённые значения. Для уточнения выполняют квантово-химические расчёты, которые требуют значительных вычислительных ресурсов и проводятся на суперкомпьютере **«СКИФ Cyberia»** ТГУ.

Сам Леонид Кузнецов подчёркивает, что экспериментальные данные остаются приоритетными, поскольку любые расчёты содержат погрешности. В проекте также участвует **Андрей Завильгельский**, который отвечает за автоматизацию вычислений и статистический анализ результатов. А руководителем проекта является директор Центра управления научно-технологическими и инновационными проектами ТГУ, доктор физико-математических наук, профессор **Александр Ворожцов**.



Андрей Завильгельский

«Трубка» вероятности лучше миллиона траекторий

Вторая разработка учёных ТГУ решает другую проблему — скорость оценки риска столкновения астероида с Землёй. Классический подход предполагает расчёт миллионов виртуальных траекторий методом Монте-Карло. На одном современном компьютере проверка миллиона частиц на 30-летнем интервале занимает около двух суток, а если объект уже близко, времени на такой расчёт может не быть.

Доцент кафедры астрономии и космической геодезии ТГУ **Алексей Батурин** предложил искать не все возможные варианты, а наиболее вероятные точки столкновения. Начальные параметры орбиты известны с некоторой погрешностью, и область неопределённости описывается шестимерным доверительным эллипсоидом. Вместо тотального перебора исследователь точечно находит начальные условия, ведущие к столкновению, и оценивает их вероятность с помощью метода условной минимизации доверительного коэффициента.



Найденные точки охватываются вытянутой шестимерной областью — своего рода «трубкой» — и равномерно заполняются 10 тысячами новых виртуальных частиц. Итоговая вероятность вычисляется как доля столкнувшихся частиц, умноженная на среднюю плотность вероятности и объём области.

Учёные проверили этот метод на трёх потенциально опасных астероидах — 2024 QP2, 2024 TW17 и 2024 YT7. Для первых двух сталкивающиеся орбиты лежат далеко за пределами начальной области доверия, что говорит об их крайне малой вероятности столкновения с Землёй. Для 2024 YT7 точки оказались ближе к центру области, но оценка вероятности всё равно осталась очень низкой. Контрольный прогон миллиона частиц методом Монте-Карло не показал ни одного столкновения, что согласуется с выводами нового подхода.

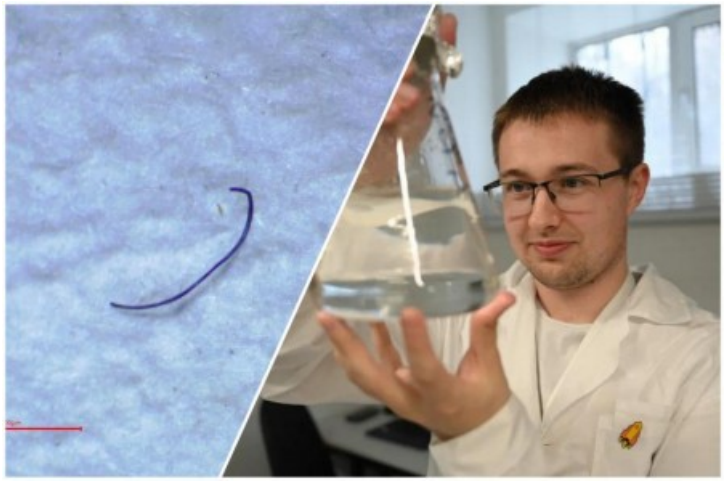


Батурин отмечает, что метод приближённый, но область столкновительных точек определяется «с запасом»,

чтобы гарантированно их охватить. Точность результата зависит от длительности и качества наблюдений за орбитой. Главное преимущество — скорость: в ряде случаев вместо миллиона траекторий достаточно около 10 тысяч точек, что сокращает время расчёта примерно в сотни раз.

Ранее Бабр писал, что за последние два года концентрация атмосферного микропластика в покрове снега Западной Сибири существенно выросла, а его опасность для здоровья человека продолжает постепенно увеличиваться. К такому тревожному выводу пришли учёные Томского государственного университета.

Фото: news.tsu.ru, gismeteo.ru



Автор: Андрей Тихонов © Babr24.com
НАУКА И ТЕХНОЛОГИИ, ОБРАЗОВАНИЕ, ТОМСК
63 19.11.2026, 23:47
URL: https://babr24.com/?IDE=299797 Bytes: 5684 / 4856

Версия для печати
Поделиться в соцсетях:

ВКонтакте Одноклассники Telegram
WhatsApp Viber Почта

Также читайте эксклюзивную информацию в соцсетях:
- *Телеграм*
- *Джем*
- *ВКонтакте*
- *Одноклассники*

Связаться с редакцией Бабра в Томской области:
tomsk.babr@gmail.com

Автор текста: **Андрей Тихонов**.

НАПИСАТЬ ГЛАВРЕДУ:

Телеграм: @babr24_link_bot
Эл.почта: newsbabr@gmail.com

ЗАКАЗАТЬ РАССЛЕДОВАНИЕ:

эл.почта: bratska.net.net@gmail.com

КОНТАКТЫ

Бурятия и Монголия: Станислав Цырь
Телеграм: @bur24_link_bot
эл.почта: bur.babr@gmail.com

Иркутск: Анастасия Суворова
Телеграм: @irk24_link_bot
эл.почта: irkbabr24@gmail.com

Красноярск: Ирина Манская
Телеграм: @kras24_link_bot
эл.почта: krasyar.babr@gmail.com

Новосибирск: Алина Обская
Телеграм: @nsk24_link_bot
эл.почта: nsk.babr@gmail.com

Томск: Николай Ушайкин
Телеграм: @tomsk24_link_bot
эл.почта: tomsk.babr@gmail.com

Прислать свою новость

ЗАКАЗАТЬ РАЗМЕЩЕНИЕ:

Рекламная группа "Экватор"
Телеграм: @babrobot_bot
эл.почта: eqquatoria@gmail.com

СТРАТЕГИЧЕСКОЕ СОТРУДНИЧЕСТВО:

эл.почта: babrmarket@gmail.com

Подробнее о размещении

Отказ от ответственности

Правила перепечаток

Соглашение о франчайзинге

Что такое Бабр24

Вакансии

Статистика сайта

Архив

Календарь

Зеркала сайта