

## להתגבר על מגבלת הזמן של סימולציה

המחקר נערך בהובלת הדוקטורנט אופיר בלומר, בשיתוף פעולה עם פרופ' שלומי ראובני וד"ר ברק הירשברג [מבית הספר לכימיה בפקולטה למדעים מדויקים ע"ש ריימונד וברלי סאקלר](#). המחקר פורסם במגזין היוקרתי Nature Communications.

החוקרים מסבירים כי סימולציות דינמיקה מולקולרית הן כמו מיקרוסקופ וירטואלי. הן עוקבות אחר התנועה בזמן של כל אחד מהאטומים במערכות כימיות, פיזיקליות וביולוגיות כמו חלבונים, נוזלים וגבישים. הן מספקות תובנות אודות מגוון רחב של תהליכים, ומשמשות במספר יישומים טכנולוגיים, בהם פיתוח תרופות חדשות. אולם, הסימולציות מוגבלות לזמנים הקצרים ממיליונית השנייה, ולכן לא מסוגלות לתאר תהליכים המתרחשים לאט יותר, כמו קיפול חלבונים והיווצרות גבישים. מגבלה זו מוכרת כבעיית סקלת הזמנים, והיא אחד האתגרים הגדולים בתחום.

" במחקר החדש הראינו כי ניתן להתגבר על המגבלה באמצעות אתחול אקראי של הסימולציות (stochastic resetting)", מסביר הדוקטורנט אופיר בלומר. " במבט ראשון, הדבר נראה מנוגד לאינטואיציה - כיצד יתכן שהסימולציות יסתיימו מהר יותר אם מתחילים אותן מחדש? אבל כשבוחנים את הנושא לעומק מתברר שהתשובה נעוצה בכך שאם נחזור על הניסוי בסימולציה פעמים רבות, הזמן שייקח לו לסיים ישתנה מאוד. לפעמים יסתיים מהר, ולפעמים יתקע במצבי ביניים זמן ממושך. אתחול הסימולציות מונע מהן להיתקע במצבי ביניים אלו, ומקצר את הזמן הממוצע לסיום התהליך. "

במסגרת המחקר, החוקרים שילבו את האתחול האקראי עם מטאדינמיקה, שיטה פופולרית לסימולציות של תהליכים איטיים. השילוב איפשר האצה רבה יותר מכל אחת מהשיטות בפני עצמה. יתרה מזאת, מטאדינמיקה זקוקה לידע מוקדם רב על התהליך כדי להצליח להאיץ את הסימולציות. השילוב עם אתחול אקראי מקטין תלות זאת מאוד, וחוסך לכימאים מאמץ רב כדי להריץ אותן. לבסוף, הראו החוקרים כי השילוב מאפשר ניבוי מדויק יותר של הקצב של התהליכים האיטיים. השיטה המשולבת שימשה בהצלחה להאצת הדגימה של קיפול חלבון במים, ובעתיד תאפשר להאיץ סימולציות של מערכות גדולות אף יותר.