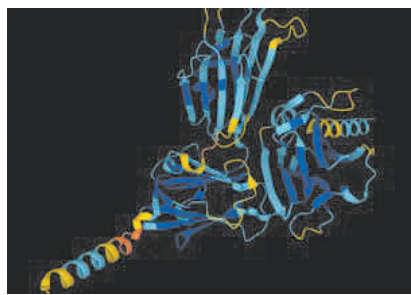


AI预测超过2亿个蛋白质结构 有望加快新药研发



预测蛋白质的结构是生物学的重大挑战之一。
图片来源:英国《新科学家》杂志网站

科技日报北京7月31日电(记者刘震)据英国《新科学家》杂志网站近日报道,总部位于英国的人工智能公司“深度思维”宣布,将公布超2亿个蛋白质的结构。该公司在短短18个月内,凭借“阿尔法折叠”算法,预测了迄今被编目的几乎所有蛋白质的结构,破解了生物学领域最重大的挑战之一,将助力对抗生素耐药性、加速药物开发并彻底改变基础科学。

几十年来,根据氨基酸序列确定蛋白质形状一直是生物学领域的一大难题。2020年底,“深度思维”宣布,该公司的“阿尔法折叠”算法能准确预测折叠蛋白质的结构;2021年

中,该人工智能已经能绘制人体内98.5%的蛋白质。近日,该公司宣布将公布超2亿个蛋白质的结构,几乎所有这些蛋白质都被编入全球公认的蛋白质数据库UniProt。

“深度思维”也在与欧洲分子生物学实验室下属欧洲生物信息学研究所合作,创建一个可搜索数据库“阿尔法折叠蛋白结构数据库”,研究人员可轻松、自由地访问相关信息,使搜寻蛋白质结构变得几乎和网络搜索工具一样简单。

很多科学家正在利用“阿尔法折叠”推进多个领域的研究,如牛津大学的马特·希金斯等人正在研究一种他们认为是中斯疟疾寄

虫生命周期的关键蛋白质,希望研制出有效的疟疾疫苗;也有科学家用其设计新酶来分解塑料垃圾,并进一步了解使细菌对抗生素产生耐药性的蛋白质。

伦敦帝国理工学院的基思·威廉森表示,“阿尔法折叠”改变了生物学研究,但仍存在一些问题,如它无法提取任意氨基酸序列,并精确模拟它们的折叠方式,也无法揭示蛋白质之间复杂的相互作用,另外,其在准确性方面还有待改进。

“深度思维”公司表示,目前正致力于提高该工具的准确性,以进一步了解蛋白质如何生成以及细胞如何工作。

比人脑突触快百万倍 高能效质子可编程电阻器开发成功

科技日报北京7月31日电(记者张梦然)美国麻省理工学院研究人员组成的多学科团队正着手推动提高一种人工模拟突触的速度极限。他们在制造过程中使用了一种实用的无机材料,使设备运行速度比以前的版本快100万倍,也比人脑中的突触快约100万倍。该研究近日发表在《科学》杂志上。

麻省理工学院开发的这种无机材料使电阻器非常节能。与早期版本的设备中使用的材料不同,新材料与硅制造技术兼容。这一变化使制造纳米级设备成为可能,并可能为集成到深度学习应用的商业计算硬件铺平道路。

该装置的工作机制是将最小的离子一质子通过电化学反应,插入绝缘氧化物中,以调节其电子导电性。因为研究使用非常薄的设备,因此可通过使用强电场来加速这种离子的运动,并将这些离子设备推送到纳秒级的运行状态。

这一设备极大地提高了神经网络的训练速度,同时大大降低了执行训练的成本和能量。这可帮助科学家更快地开发深度学习模型,然后将其应用于自动驾驶汽车、欺诈检测或医学图像分析等用途。研究人员描述称,这不是一辆“更快的汽车”,而是一艘“宇宙飞船”。

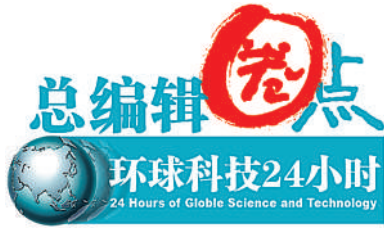
这一技术的关键元素是质子可编程电阻器,这些电阻以纳米为单位排列成阵列,就像棋盘一样。

在人脑中,学习是由于神经元之间的连接(称为突触)的增强和减弱而发生的。神经网络长期以来一直采用这种策略,新处理器则利用增加和减少质子电阻器的电导,实现模拟机器学习。

为了开发这种超快速且高能效的可编程质子电阻器,研究人员寻找了不同的电解质材料——无机磷硅玻璃(PSG)。PSG能够实现超快质子运动,还可承受非常强的脉冲电场。这一点非常关键,因为向设备施加更多电压,可使质子以惊人的速度移动。

研究人员表示,因为质子不会损坏材料,电阻器可运行数百万次循环而不会损坏。这种新的电解质使可编程质子电阻器的速度比以前的设备快100万倍,并且可在室温下有效运行,这对于将其整合到计算硬件中非常重要。

人工智能领域的研究者看到这条新闻时,可能会眼前一亮。近年来,市场开发出的神经网络规模越来越大,神经节点越来越多,参数也越来越复杂。这些都在推动人工智能变得更加“聪明”。但随之而来的是,大型深度神经网络的搭建成本和训练成本十分高昂,能耗也不低。这对希望搭建自己的人工智能训练模型的创业公司或小微企业来说,并非利好。高能效质子可编程电阻器可以提高人工智能神经网络的训练速度,同时降低训练的成本和能耗,人工智能的发展又多了一块“铺路石”。



相向而行 促进旨在相互了解的“中国能力”建设

今日视点

◎本报驻德国记者 李山

近年来,“中国能力”成为德国的热门话题。在德工作的华人教授得益于深厚的中德双文化背景,对此有着更加深刻理解。近日,科技日报记者应邀参加德国华人教授协会主办的“中国能力”论坛。“深化相互了解,坚持平等对话,理性看待合作与竞争。”是这一别开生面的论坛给记者留下的深刻印象。

搭建文化交流的桥梁

“我特别高兴德国华人教授协会能在杜伊斯堡-埃森大学主办以德国的‘中国能力’为主题的论坛。”杜伊斯堡-埃森大学副校长卡伦·谢尔教授在开幕致辞中热情洋溢地说。围绕“中国能力”的主题,谢尔教授介绍了杜伊斯堡-埃森大学多年来与武汉大学等中国高校建立的良好合作伙伴关系,谈到了中国的“丝绸之路”倡议给杜伊斯堡港带来的变化,以及目前的舆论和政治压力。她强调说:“尽管如此,杜伊斯堡-埃森大学将继续与孔子学院合作。我们深知‘中国能力’源于多年的合作伙伴关系。”

德国华人教授协会主席、明斯特大学数学与计算机科学系主任蒋晓毅教授介绍说,成立于2006年的德国华人教授协会旨在通过共同的文化背景促进成员的交流与合作,并支持中德之间的学术交流。随着中德关系的发展,尤其是教育界的广泛交流,德国华人教授人数已经增长到80多位。由于新冠疫情的影响,今年也是协会时隔3年首次召开线下会议。蒋晓毅强调说:“在目前国际局势以及中德关系发展的特殊背景下,促进德国的中国能力建设意义深远,德国华人教授应该作出一份努力。”

会议主办方、杜伊斯堡-埃森大学医学院陆蒙吉教授表示,在德国发展“中国能力”是一个影响我们所有人的多方面而且复杂的话题,德国华人教授对两国最有深刻的了解,应该在这个话题上发表自己的意见。

中国驻德使馆教育处黄伟公参赞上致称:“作为独立的智囊团体,德国华人教授协会凝聚了在德华人教授的集体智慧,鼓励和扶持华人学者在德国高校和科研机构的学术发展,并在促进中两国之间高等教育和科技领域的交流与合作方面,发挥了重要的跨



文化、跨学科的桥梁作用。”

培养真正的“中国能力”

德国著名汉学家、前杜伊斯堡孔子学院德方院长托马斯·海贝勒教授详细解读了何谓“中国能力”。研究中国已经50多年的海贝勒引述了美国著名汉学家费正清的名言:试图在不了解中国历史的情况下了解当代中国,就像在山中盲目飞行。

与那种靠二手资料研究中国的所谓“中国问题专家”不同,海贝勒反复强调:“如果你想传达关于中国的知识,你需要第一手数据。良好的中文能力,与中国各界保持联系,并且经常到中国不同的地区去深入研究,是培养‘中国能力’的必要条件。”在他看来,中国正在通往世界技术顶峰的道路上,到2035年将引领世界十大高科技领域。

克劳斯塔尔工业大学、下萨克森州能源研究中心侯正猛教授介绍了他负责的中国能力中心的发展情况,以及连续举办四届的克劳斯塔尔工业大学“中国周”活动。慕尼黑应用管理大学唐敏教授介绍了她们的中德创造力互动项目。无论是“中国周”活动中邀请重要人物参与,还是互动项目中赴中国的实地考察,教授们从实践中探索出许多加强“中国能力”的宝贵经验,包括增加相关活动的参与

感,鼓励感兴趣的朋友去中国亲自感受,坚持平等的对话等等。

华人教授协会荣誉主席、德国国家科学院院士、慕尼黑工业大学孟立秋教授主持第一个嘉宾讨论,内容涵盖孔子学院的活动,舆论和政治压力对中德经济合作的影响,以及中德合作中有待改进的方面。

如何解决这些有待改进的问题,孟立秋说,一是平等对话,倾听以及理解彼此的想法。二是并肩前进,中德合作是一种携手并肩的关系。三是正视现实,保持谨慎乐观的态度。四是综合两种文化思考问题,关注和加强文化之间的共性。孟立秋感言,教授协会尽管人数有限,无法推动伟大的事情,但可以尝试以创新方式去推动一些小事,并在中德合作过程中信任对方和自己。

理性看待合作与竞争

在论坛的第二部分,纽伦堡工业大学的韦乃铭教授介绍了德国经济对中国依赖度的一些基本数据,分析了2016年中国美的集团收购德国机器人制造旗舰企业库卡所带来的深远影响,以及德国联邦政府开始强调技术主权的过程,并主持了嘉宾讨论。马格德堡应用科技大学副校长丁永健教授、德国国家工程院院士汉堡大学张建伟教授、前赢创工业公司董事俞

大海博士分别就德国与中国在经济、能源政策和前沿研究方面的发展趋势进行了讨论。

俞大海谈到,中国和欧盟在某种程度上减少双方依赖性正常现象。中国正在大力开发自主的技术,对欧美的技术依赖性在降低。另一方面,中国在积极发展东南亚、非洲和南美市场。欧盟企业现在需要考虑的是如何找到新的与中国共同合作的领域。

丁永健表示,首先要看到中国企业收购库卡给德国社会带来了强烈的心理冲击。其次,分析中德之间所谓的2%的依赖程度,如果看几个具体的领域,影响还是非常大的。例如汽车领域德国对中国的依赖度可能就高达40%,化工领域更是离不开中国。

张建伟表示,最近20年来,中国的科技飞速发展,很多科技攻关项目陆续取得良好效果。中国的产业链完备,许多商用产品开发速度领先于欧美。以机器人技术为例,2016年收购的库卡,当时还算先进,但现在中国企业已经快速赶上,在最近的自动化展会中,先进的协作机器人一半与中国企业有关。中国在新的科技领域,例如人工智能、电动汽车、自动驾驶等,有很多的优势,其中就包括庞大的工程技术人才。因此,如果说欧洲或德国对中国有依赖的话,应该主要是依赖中国丰富的人才。将来如果中国的人才不再青睐德国,那才是大问题。

国际要闻回顾

(7月25日—7月31日)

国际聚焦

不依赖设备的量子密钥分发实验首次演示

量子物理学的基本定律限制了对对手最终可以拦截多少信息,只需对所使用的物理设备进行一些一般性假设,就可以保证安全性。这种“独立于设备”的方案长期以来一直受到追捧,但迄今仍然遥不可及。现在,英国、瑞士及法国的研究团队在《自然》杂志报告了此类协议的首次演示,从而朝着提供强大安全性的实用设备迈出了决定性的一步。

科“星”闪耀

超声波贴纸,贴上能看到体内器官

美国麻省理工学院的工程师展示了一种新的超声波贴纸设计,这种可贴在皮肤上的邮票大小的设备,可提供48小时内脏器的连续超声波成像。当志愿者进行各种活动(包括坐、站、慢跑和骑自行车)时,这些贴纸保持了很强的附着力,并捕捉到了器官的变化。

科学争鸣

CRISPR疗法或致遗传物质大幅损失

以色列特拉维夫大学的最新研究确定了使用CRISPR疗法的风险。在调查CRISPR技术对T细胞(免疫系统的白细胞)的影响时,研究人员检测到高达10%的遗传物质损失。研究人员解释说,这种损失会导致基因组不稳定,从而可能导致癌症。

蓦然回首

首个DNA材料制成的纳米马达面世

德国科学家首次成功使用DNA

折叠法制造出了一款分子马达。这种由遗传物质制成的新型纳米马达可以自我组装并将电能转换为动能,可以开关,还能通过施加电场控制其转速和旋转方向,未来有望用于驱动化学反应。

技术刷新

CRISPR技术防治新冠肺炎动物试验成功

美国杜克大学科学家利用CRISPR技术,成功预防并治疗了实验鼠的新冠肺炎,这或许是科学家首次借助该技术治疗新冠肺炎。人体实验如获证实,有望帮助人类应对新冠病毒变异毒株。

前沿探索

DNA重组广泛存在人类基因组中

日本理化学研究所综合医学科学中心科学家主导的国际合作研究发现,在人类每个细胞的基因组中,重复数百万次的特定基因组序列重组普遍存在于正常细胞和疾病状态的细胞中。确定这种曾被认为是“垃圾”的DNA序列的重组机制,对于了解人体细胞如何发育以及是什么导致它们“生病”至关重要。

量子位控制新法可推进量子计算机发展

为了达到量子计算机能够满足其预期性能潜力的程度,需要开发大规模的量子处理器和存储器。要做到这一点,精确控制量子位至关重要,但控制量子位的方法对于高精度的大规模高密度布线来说存在局限性。日本横滨国立大学研究人员找到了一种可精确控制量子比特方法。这一进展是朝着更大规模量子计算迈出的一步。
(本栏目主持人 张梦然)

生物传感器:废旧光盘的“第二次生命”

科技日报北京7月31日电(实习记者张佳欣)由于电子产品寿命短暂,电子垃圾已经成为全球性问题。美国纽约州立大学宾厄姆顿大学的一项新研究给了废弃的光盘“第二次生命”——将它们变成廉价且易于制造的柔性生物传感器。

近日发表在《自然·通讯》杂志的一篇论文中,研究人员展示了如何将金色光盘的薄

金属层从坚硬的塑料中分离出来,制成传感器,以监测人类心脏和肌肉的电活动,以及乳酸、葡萄糖、pH值和氧气水平。这些传感器可通过蓝牙与智能手机进行通信。

制作的第一步是使用化学工艺和胶带从塑料上去除金属涂层,然后用胶带把金属层粘下来,接着对薄层进行加工,使其具有柔韧性。

制作过程在20到30分钟内完成,不会释放有毒化学物质,也不需要昂贵的设备,每个设备的成本约为1.50美元。将这种电子垃圾升级回收的可持续方法不需要尖端的微加工设备,昂贵的材料或高水平的工程技能。

为了制造传感器,研究人员使用了Cricut切割机,这是一种现成机器,可对纸、乙烯基和烫金转印等材料进行切割。然后,柔性电

路将被移除并粘在一个人身上,在智能手机应用程序的帮助下,医疗专业人员或患者可获得读数,并随着时间推移跟踪进展。

研究人员表示,此次使用的是金色光盘,他们将探索同样的过程是否适用于更常见的银色光盘。同时,他们还将研究是否可利用激光雕刻来进一步提高升级改造光盘的周期速度。

英研究称儿童不明肝炎病因有新线索

科技日报巴黎7月30日电(记者李宏策)综合法国媒体报道,英国近日发表的两项尚未经过同行评审的研究,对儿童不明肝炎的病因提供了新线索,即病毒合并感染和自身遗传问题可能导致儿童重症肝炎。

据世界卫生组织统计,目前已有35个国家报告了至少1010例儿童不明肝炎病例,大多数患病儿童在6岁以下,其中有46人进行了肝脏移植,22人死亡。

此前研究指出,儿童不明肝炎可能与41型腺病毒感染有关。但该病毒通常在免疫

功能低下的儿童中引发肝损伤,而免疫系统正常的儿童从未出现过这种情况。

最新发布的这两项研究中,英国研究者指出了另一种可能性,其在96%的患者体内发现了一种通常被认为无害的病毒——腺相关病毒2型(AAV2)。大多数儿童在10岁前会感染AAV2,该病毒不能自己复制,通常不会引起疾病,但其可以潜伏在细胞中,直到辅助病毒出现并激活它。

英国研究人员在25名患有不明肝炎的儿童血液或肝细胞样本中寻找到约200种病毒,

除1人外,其他患者体内均检测到较高水平的AAV2。伯明翰大学儿科肝病教授迪尔德丽·凯利在一份声明中称,“我认为这是对病例的一个合理解释,合并感染似乎起着关键作用。目前还不清楚为什么一些儿童会出现需要肝脏移植的严重情况,也许因是不止一种病毒合并感染。”

苏格兰格拉斯哥大学的研究人员还发现,部分重症儿童的人类白蛋白抗原遗传基因存在突变,这会引发免疫系统对感染的方式,或导致产生过激的免疫反应。近16%

的苏格兰人有这一基因突变,而苏格兰是报告不明儿童肝炎病例最早的地区。

两个研究团队都排除新冠病毒感染是不明肝炎的直接病因,其在患病儿童的肝脏中未检测到新冠病毒,在这些患病儿童中检出新冠病毒抗体的比例与整体儿童抗体比例相当。

科学家们仍不清楚为什么不明原因肝炎病例会在新冠肺炎疫情期间出现。一种假设是,由于各国普遍采取封控措施,导致许多婴幼儿比平时更晚接触到某些常见病毒,因而失去了对这些病毒的早期免疫力。