

# 《自然》公布影响2022年科学进程十大人物

## 北京大学基因组学研究人员曹云龙入选



科技日报北京12月14日电(记者张梦然)《自然》本周公布了2022年度十大人物(Nature's 10)榜单,榜单旨在评选出在这一年重大科学事件中占有一席之地的人物。《自然》特写主编理查德·蒙纳斯特斯基表示:“在这充满危机和精彩发现的一年里,十位人物既有帮助我们探知宇宙最遥远存在的天文学家,也有在新冠疫情和猴痘疫情中举足轻重的研究人员,还有突破器官移植局限的外科医生。”

《自然》此次评选了在全球公共卫生问题上有突出贡献的几位人物。新冠疫情进入第3年,北京大学基因组学研究人员曹云龙帮助追踪新冠病毒的演化,并预测了导致新变异株产生的部分突变;丽莎·麦考尔作为“患者主导研究合作组织”的创始成员,帮助提高了公众对新冠肺炎的认识,并筹集了研究经费;多米·奥戈纳是尼日利亚尼日尔三角

洲大学的传染病医生,他对尼日利亚猴痘传染病的防控工作提供了对抗猴痘疫情的关键信息。

几位人物推动了非凡的科学成就和重要的政策进展。美国马里兰大学巴尔的摩分校的外科医生穆罕默德·莫希丁带领团队完成了首次转基因猪心脏的人体移植;美国国家航空航天局(NASA)戈德航天中心天文学家简·里格比在韦布空间望远镜进入太空并正常工作的任务中起到了关键作用,让人类探索宇宙的能力迈上了更高的新台阶;美国科技政策办公室代理主任阿隆德拉·纳尔逊帮助拜登政府制定了其科学议程的重要内容;美国加州大学旧金山分校人口学家黛安娜·格林·福斯特就美国最高法院推翻对堕胎权法律保护这一决定的预期影响提供了关键数据。

在今年的十大人物榜单上,有一些名字

与气候变化和其他全球危机的发展息息相关。联合国秘书长安东尼奥·古特雷斯呼吁各国积极应对气候变化等危机;位于孟加拉国达卡的国际气候变化与发展中心主任萨利穆尔·胡克积极推动发达国家承诺承担气候变化造成的“损失与损害”;联合国政府间气候变化专门委员会(IPCC)乌克兰代表团团长斯维特兰娜·克拉科夫斯卡提出了地缘政治与化石燃料间的关联。

《自然》称,现代科学研究是由团队,且往往是大型团队合作完成的,然而科研世界也充满了个人产生影响的故事。《自然》年度十大人物并非一个奖项,也不是全球前十排行榜,它是对今年重要科学进展、事件以及其中一些关键人物和他们同事的记录。

蒙纳斯特斯基表示:“《自然》十大人物的故事以独特视角浓缩了这不平凡一年中的一些最重大的科学事件。”

科技日报北京12月14日电(记者刘震)美国能源部13日宣布,劳伦斯·利弗莫尔国家实验室内的美国国家点火装置(NIF)首次实现聚变点火——反应产生的能量大于促使反应发生的能量;在12月5日的一次实验中,研究人员向目标输入2.05兆焦耳的能量,产生了3.15兆焦耳的聚变能量输出,首次实现了净能量增益。

美国能源部长詹妮弗·格兰霍姆当天发表声明称,这是一项“里程碑式的成就”,无疑将激发更多新成果。中国科学院院士李俊峰对科技日报记者表示:“最新进展具有重要意义,至少表明约2兆焦耳激光能量能够产生聚变能超过输入能量,达到净能量增益。但实验不能重复,并不具备实用意义。”

李俊峰院士解释说,核聚变是两个轻原子核结合生成一个较重的原子核并释放出巨大能量的过程,也是太阳内部的供能过程。核聚变产生的能量非常大,而且不排放二氧化碳;另外,与核裂变相比,它既不会产生核废料,辐射也极少。由于拥有清洁且高能特性,核聚变技术被视为未来清洁能源领域的发展方向。

目前可行的核聚变主要有两种方法,分别使用磁场和激光来约束等离子体。NIF使用第二种方法,这种方法也被称为惯性约束聚变(ICF)。在实验中,192束激光束轰击一个装有氢燃料的微小“胶囊”,使其升温并迅速膨胀,直至内爆,在惯性约束下,产生高温高压等离子体,最终实现聚变点火。

包括中国、欧盟等参与的“国际热核聚变实验堆”(ITER)则采用磁约束——反应堆使用甜甜圈形状的托卡马克装置,利用磁场使等离子体悬浮,同时注入能量以启动核聚变反应。位于英国牛津的欧洲联合环状反应堆(JET)去年12月在持续5秒的反应中产生了59兆焦耳的热能,创下当时全球核聚变新纪录。

利弗莫尔国家实验室主任金·布迪尔解释说:“激光核聚变不仅在科学方面,而且在技术方面,都存在非常重大的障碍。目前,我们一次点火一个燃料小球,要实现商业聚变能,必须每分钟点火多次,还必须拥有一个强大的激光系统。”

这确实是近日能源圈的“大新闻”!有史以来第一次,人类实现了核聚变反应的净能量增益。它确实是一个漂亮的里程碑式的成果。核聚变是结合原子核以产生能量的过程,若能持续生产出安全的核聚变能源,则意味着掌握了无限的清洁能源。当然,此次实验中产生的能量只能烧开15到20壶水,只能在实际上验证了惯性约束聚变这一路线的可行性,离商用还距离遥远。实际上,我国也在可控核聚变领域做了多方布局,在技术创新的路上不断推进。

### 美国国家点火装置首次实现净能量增益

但距离实用核聚变仍然遥远

# 辉瑞新冠药,“阳了”就能吃?

## 国际战“疫”行动

◎本报驻以色列记者 胡定坤

据国内多家媒体12月13日报道,多个互联网医药平台已开始或即将放开销售辉瑞研制的奈玛特韦片/利托那韦片组合包装(Paxlovid)新冠口服药,患者只需上传核酸或抗原阳性证明、被诊断为新冠病毒感染,即可开具处方线上购买,价格接近3000元每盒。但随后相关平台否认上述消息,其应用程序和网页上也已无法找到预售信息。

辉瑞新冠药,真的阳了就能吃吗?

### 用药限制多,警惕副作用

首先,Paxlovid在美国食品药品监督管理局(FDA)只被批准用于治疗12岁以上、有轻度至中度症状、同时病情恶化风险较高的新冠病毒感染者。在我国和欧洲,都仅被批准

用于治疗成人伴有进展为重症高风险因素的轻至中度的新冠肺炎患者。换句话说,该药并不适用于重症风险较低人群,例如无基础病、接种疫苗的年轻人。

同时,辉瑞公司公布的EPIC-HR(指对高危患者的新冠肺炎的蛋白酶抑制进行评估)研究指出,该药有比较广泛的药物禁忌。Paxlovid是一种强效的CYP3A抑制剂,而CYP3A是人体内非常重要的药物代谢酶,超过50%的临床用药由CYP3A代谢。因此,服用Paxlovid或大幅增加CYP3A代谢物在人体血液中的浓度,这可能带来非常严重的药物不良反应。

根据Paxlovid的说明书,该药禁止与治疗高血压和前列腺增生常用药阿夫唑嗪、抗心绞痛药雷诺嗪、抗心律失常药胺碘酮、决奈达隆、氟卡尼、普罗帕酮、奎尼丁、抗痛风药秋水仙碱、心血管药依普利酮、伊伐布雷定,常用降脂药洛伐他汀、辛伐他汀,偏头痛药依来曲普坦,以及西地那非等数十种药物共同使用,否则可能产生严重甚至威胁生命的反应。同

时,还有部分常用药,如华法林、地高辛、克拉霉素、红霉素等在与Paxlovid共同使用时,需密切监测血液药物浓度或调整剂量。

以色列是全球最早批准使用Paxlovid的国家之一。根据以色列最大医疗服务组织Clalit发布的医疗指南,Paxlovid仅给高龄或患有某些疾病的“高危人群”使用,且在使用该药之前,患者必须向医生或药剂师报告病史,特别是过敏以及肝脏、肾脏疾病,还必须报告正在服用的任何其他药物,包括膳食补充剂和草药,在接受Paxlovid治疗期间,不得在未告知医生的情况下服用任何新药。

### 药效对年轻人不明显,对老年人更有效

今年9月,Clalit研究团队在《新英格兰医学杂志》发表论文,根据其提供的相关数据,2022年1月9日至3月31日,该组织有约116万5千人感染新冠病毒,其中40岁以上的高

危人群约15万人,而高危人群中近4万人存在“医疗禁忌”无法使用Paxlovid,在符合条件使用该药的约11万患者中,真正接受其治疗的仅有3902人,占比不到4%。

统计结果显示,在65岁以下人群中,接受Paxlovid治疗的患者平均每10万人每日有15.2人住院,而未接受该药治疗的患者平均每10万人每日有15.8人住院。在65岁以上人群中,接受Paxlovid治疗的患者平均每10万人每日有14.7人住院,未接受该药治疗的患者平均每10万人每日有58.9人住院,这表明Paxlovid可能对年轻人效果并不明显,对老年人更有效。

不过,研究团队坦言,不知道为何大量符合条件的患者没有接受Paxlovid治疗,其中可能存在无法解释的“选择机制”,这或对论文结论造成影响。今年1月20日,以色列《国土报》报道称,该国医疗服务组织在提供Paxlovid上面面临复杂挑战,原因既包括其药物禁忌过多,医生需慎重考虑是否提供给患者,也包括不少患者因担忧药物副作用而拒绝接受治疗。

## 广告

# 降低AI for Science 门槛 实现生命科学领域新突破



说到AlphaGo,一般人都或多或少听说过,它因击败了人类围棋大师被誉为“世界壮举”,标志着人类向通用型的人工智能迈出了具有里程碑意义的重要一步。

而如今在前沿科学研究中的AlphaFold2模型则是人工智能(AI)应用的另外一个标志,它因展现出AI for Science的巨大潜力,而受到了各界人士的青睐。

### AlphaFold2 助蛋白质结构预测,树AI for Science新高度

蛋白质是组成人体细胞组织的重要成分,对蛋白质三维结构开展有效解析与预测,可为生物学、医学、药学乃至农业、畜牧业等行业未来研究与发展提供重要依据,尤其对与人类健康直接相关的药物研发意义重大。

然而,用X光、冷冻电镜、核磁共振等传统方法对蛋白质结构进行解析,远赶上氨基酸序列的增加速

度,这会造成海量待测样品在实验室中等待数月乃至数年。国际权威数据库SWISS-PROT显示,目前累计的蛋白质序列的信息已经超过56万,用传统方法去完成这浩瀚繁多的测序无疑成为“不可能完成的任务”,须另辟蹊径。

科技创新的车轮滚滚向前。如前文所述,人工智能的发展为蛋白质测序效率带来了契机。其中AlphaFold2模型让人工智能在生物医药领域发挥着重要的作用。

一般来说,人工智能方法的预测精度超过90%,便可认为预测结果与实验方法得到的蛋白质结构基本一致。而AlphaFold2的92.4分,其不仅可以分析X-射线晶体学很难解决的膜蛋白细胞膜中的蛋白质结构,还成功解开了蛋白质折叠问题,甚至可以帮助研究者制造自然界中不存在的蛋白质。

AlphaFold2带来的这些重大突破,标志着AI辅助药物基础理论研究进入新的阶段,树立了AI for Science新高度。

比如,目前全球设计的几乎所有的药物都作用于蛋白质,通俗讲,需要像钥匙开锁般精确匹配,而此过程的第一步是确定哪把钥匙开哪把锁,用更专业的话说,就是寻找药物靶标,即弄清楚药物分子作用与何种蛋白结合。而通过可解码蛋白质结构的人工智能算法,就可快速筛选成千上万的新药物靶标,从而大

### 端到端优化AlphaFold2,让人工智能更普适经济

AlphaFold2为蛋白质结构解析与预测提供了新窗口,然而随着其在产、学、研各细分领域中的落地,也遇到严峻挑战。例如,随各种应用对于推理高通量和高性能的需求与日剧增,使用者需要更加充分地挖掘平台计算潜力,来提升执行效率。

所谓高通量测序技术,也被称为革命性的蛋白质测序方法,也是“十四五”时期生物经济领域重点推进创新应用的一项关键技术,简单讲就是一次并行对大量核酸分子进行平行序列测定的技术,但实施一次测序就能产生不低于100Mb的数据,这巨大的数据量给AlphaFold2的应用带来很大困扰。

原来,AlphaFold2刚问世时对于算法和硬件架构本身等问题,如GPU的并行计算,但是这类硬件存在严重的内存限制,使得即便是使用单卡最大内存,能够输入去预测的蛋白质序列长度也不足1000氨基酸。

面对突破这一瓶颈的迫切需求,英特尔®架构产品——内置AI加速能力的至强®可扩展平台搭配傲腾™持久内存的产品组合,使得CPU平台得以具备TB级的内存容量,有潜力满足高通量测序需求。基于这一优势,英特尔针对不同氨基酸序列长度下蛋白质结构预测所需占用的内存开展了实验,实践表明该组合打破了限制预测序列长度的“内存墙”,实现了AlphaFold2的高通量优化。

结果显示,从短到206个氨基酸,至长到2797个氨

基酸,最终都达到了预期效果,验证了至强®可扩展平台产品组合,能够轻松应对AlphaFold2蛋白质测序从20GB至510GB的内存占用,并有助于其实现更大范围的蛋白质结构探索。

在推动AlphaFold2提升普适性、拓展应用的进程中,英特尔在发挥至强®可扩展平台产品组合提供强劲通用算力的同时,亦充分利用丰富的软件工具实施通量优化,让处理器内置的英特尔®AVX-512技术,在英特尔®oneAPI 软件工具的激活与配合下,实现并行计算加速,为AlphaFold2应用进一步提供性能调优空间。

这一软件级调优,先在预处理阶段对模型进行高通量优化,然后将模型迁移到PyTorch框架,接着再在PyTorch版本上进行细节上的推理优化,最后给予TB级内存支持,即可实现更优的加速效果。

经由上述基于至强®可扩展平台对AlphaFold2实施的端到端优化,对于一个含有765氨基酸的蛋白质测试样例,采用CPU 64个物理核并发模式,支持了最高3.2TB的内存消耗,测试通量从未经任何优化的4.56序列/天提升105.35序列/天,效率提升达23.11倍;且如果在单节点上配备最高8TB内存,就可以支持完成高于10000氨基酸序列长度下蛋白质结构的预测,为人工智能在药物研发等领域的广泛应用展现了无限可能。

在国际学术期刊《Science》联合英特尔推出的《架构师成长计划》课程中,晶泰科技的首席研发专家杨明俊博士这样谈到:“以AlphaFold2为代表的研究成果,被认为是开拓了科学研究的第四范式,就是基于大量的数据,然后采用以深度神经网络为代表的模型,给出对问题的一个解答。蛋白质结构预测曾经被认为是不可能完成的一件事情,如今被AI算法实现,这标志着AI在生物医药领域的进展迈入了一个全新的领域和阶段。”

《“十四五”生物经济发展规划》明确把加快发展高通量基因测序技术,作为开展前沿生物技术创新的重要手段;支持采用人工智能等信息技术,实现药物产业的精准化研制,进而通过生物技术与信息技术融合更好惠民。

相信在这一进程中,英特尔的架构优势也能物尽其用,其软硬兼施对AlphaFold2生物信息测序效率实现端到端优化,并使其具备更高适用性的生动实践,展现了人工智能与科学研究的相互融合,并为人类在前沿科学领域的未来发展带来了广阔的想象空间。通过不断地范式创新成果树立新的“AI for Science”里程碑,以创造更美好的未来!

AI for Science:科学智能,用AI去学习科学原理,得到模型,进而去解决实际问题。

AlphaGo:阿尔法围棋,是DeepMind公司的一个人工智能程序。

AlphaFold2:DeepMind公司的另一人工智能程序,用于蛋白质结构预测。

AI:人工智能。

GPU:图形处理器,是一种专门做图像和图形相关运算工作的微处理器。

CPU:中央处理器,计算机系统的运算和控制核心。

AVX-512:英特尔®高级矢量扩展512,是一组能够针对各种工作负载和用途(如科学模拟、深度学习、3D建模与分析等)提高性能的指令。

oneAPI:一套完整的高级编译器、库以及移植、分析和调试器工具,其利用更先进的硬件功能加速计算,可与现有的编程模型和代码库互操作。

PyTorch:是一个开源的Python(计算机编程语言)机器学习库。

图文及数据来源:英特尔(中国)有限公司

