

# 他们用AI破译蛋白质结构“密码”

## ——三位科学家分享2024年诺贝尔化学奖

◎本报记者 刘 霞

10月9日，瑞典皇家科学院揭晓了2024年诺贝尔化学奖的归属。美国华盛顿大学科学家戴维·贝克因在蛋白质设计方面的贡献，荣获该奖项一半的奖金；另一半奖金则由谷歌“深度思维”公司创始人、英国科学家德米斯·哈萨比斯和该公司美国科学家约翰·江珀共享，以表彰他们在蛋白质结构预测方面的成就。

诺贝尔化学委员会主席海纳·林克指出，今年的诺贝尔化学奖如同“双花并蒂”，他们一方面用计算软件构建出全新蛋白质结构，另一方面则基于氨基酸序列开发出名叫“阿尔法折叠2”的人工智能(AI)模型，实现对蛋白质复杂结构的预测。这两项科学突破携手开辟出巨大的可能性。

### 从头设计全新蛋白质

2024年诺贝尔化学奖“花落”蛋白质，是因为蛋白质对生命至关重要。没有蛋白质，生命就不可能存在。

蛋白质如同生命体内的“能工巧匠”，以其独特的化学能力，编织出生命的多样性与复杂性。它们掌控并驱动生命体内所有的化学反应，这些反应共同构筑了生命的宏伟蓝图。同时，蛋白质可谓“千面女郎”，扮演着激素、信号物质、抗体以及身体组织构建者等多种角色。

蛋白质通常由20种不同的氨基酸组成，这些氨基酸如同组成生命的“积木”。2003年，贝克利利用氨基酸“积木”，成功创造出一种前所未有的新蛋白质，开启了构建蛋白质的大门。构建全新蛋白质，被称为“从头设计”。而贝克团队构建氨基酸“积木”的功臣，是他们开发的名为Rosetta的计算软件。他们首先绘制了一种全新结构的目标蛋白质，然后从已知结构的蛋白质数据库中寻找与目标结构相似的短蛋白质片段；随后，Rosetta利用蛋白质能量图的基本知识，优化这些片段，给出了最终的氨基酸序列。

此后，贝克研究小组不断发挥创意，创造出的一系列富有想象力的蛋白质。这些蛋白质正在药物、疫苗、纳米材料和微型传感器等多个领域“大展拳脚”。

为预测蛋白质结构，贝克团队2021年开发出“Rosetta折叠”模型，并被《科学》杂志评为2021年年度突破。2023年，基于“Rosetta折叠”的深度学习模型“RFdiffusion”问世。该模型能测试拥有不同结构元素的设计组合，并从头开始产生蛋白质。该模型还能执行不同的任务，设计氨基酸、寡聚体(多亚基聚体)、有治疗或工业应用前景的复杂结构。

### 精准预测蛋白质结构

在蛋白质的世界里，氨基酸以长链的形式相连，折叠成复杂的三维结构，赋予蛋白质重要功能。

自20世纪70年代以来，科学家一直致力于根据氨基酸序列预测蛋白质结构，但这是一项极其艰巨的任务。因为有些氨基酸和其他氨基酸相互作用，有些氨基酸则具有疏水性。而且氨基酸链形成了复杂的形状，使精确定义蛋白质结构难度增加。

AI模型“阿尔法折叠2”的横空出世，为解决这一萦绕在科学家心头50年的难题带来转机。

2020年，哈萨比斯和江珀研制出“阿尔法折叠2”。在该模型的帮助下，科学家们已能预测2亿多种蛋白质的结构。

自问世以来，“阿尔法折叠2”得到190个国家



戴维·贝克(左)、德米斯·哈萨比斯(中)和约翰·江珀(右)因在蛋白质设计和蛋白质结构预测领域作出的贡献荣获2024年诺贝尔化学奖。

诺贝尔奖官网

和地区200多万研究人员的应用。有了这一模型，研究人员能够更深入地研究抗生素的耐药性，并设计出能分解塑料的酶。

今年5月，“深度思维”推出了“阿尔法折叠3”模型，用来帮助科学家更精确地针对疾病机制开发更有效药物。“阿尔法折叠3”能够更准确预测不同大分子之间复合物的结构，以及大分子、小分子和离子之间的相互作用。

能够预测蛋白质结构并设计全新蛋白质，是科学赋予人类最美好的礼物之一。

(科技日报北京10月9日电)

## 科学家迎来AI黄金时代

◎张梦然

在2024年最后一个诺贝尔自然科学奖项公布后，诺贝尔化学奖和物理学奖同时垂青AI领域研究者受到世人瞩目。这是AI技术在多个科学领域中广泛应用和产生深远影响的证明。

这种“跨界”的认可，表明AI已不仅仅是计算机科学的一个分支，而是成为推动科学研究和技术进步的重要工具。它为解决长期存在的科学问题提供了强有力的支持，并在多个层

面促进了科学的发展。诺奖既是对科学家个人成就的认可，也是对整个AI辅助科学研究趋势的一个肯定。

AI黄金时代的一批科学家正熠熠生辉。这场仿佛再现上世纪物理学黄金时代——从1900年到1925年，爱因斯坦、玻尔、薛定谔、海森堡、狄拉克、居里夫人等科学大师产出了大量的成果。我们期待，AI领域的创新能力为人们开启一扇扇新世界的窗户；我们相信，这次的诺奖会激励更多年轻人关注AI及其在科学中的应用，从而诞生新一代跨学科人才。

## 何立峰率中央代表团赴兵团草湖项目区慰问调研

新华社乌鲁木齐10月9日电 中共中央政治局委员、国务院副总理、中央代表团团长何立峰9日率中央代表团来到新疆生产建设兵团草湖项目区慰问调研。

在高等教育重点项目建设现场，

中央代表团详细了解项目总体规划、阶段性目标和建设进度。何立峰指出，要按照项目计划要求，质量第一，高质高效完成总体施工；要立足全疆产业现状和未来发展方向，精心打造具有竞争力的优势学科、精品专业，

构建产学研用一体发展格局，培养新疆经济社会发展急需的高素质专业人才。

在草湖经济技术开发区，中央代表团调研了开发区企业生产经营、吸纳就业、支持当地经济发展等情况。

## 江西高温超导磁体产业按下“加速键”

科技日报讯(记者魏俊)记者日前获悉，江西联创光电科技股份有限公司(以下简称“联创光电”)近期发布了监管工作函回复公告以及联创超导部分股权购买方案调整公告。

公告显示，联创光电单方面向联创超导增资3.568亿元，同时以1.338亿元收购共青城智诺嘉持有的联创超导3%股权。此外，联创光电还与智诺嘉签署表决权委托协议。交易完成后，联创光电持有联创超导47.22%股权，累计控制联创超导58.80%表决权，并获得董事会5席中的3席，实现对联创超导并表。

经过科学界多年探索，磁约束和惯性约束是两种对核聚变进行约束的主要途径。其中，磁约束能量转化效率更高，是更具发展潜力、更成熟的路线。麻省理工学院(MIT)团队今年发表6篇论文，介绍了MIT在大型高温超导磁体设计、制造和性能评估等方面的相关成果，宣称该磁体可应用于未来聚变堆中，并成功通过了严格的性能测试。

我国在高温超导应用领域也不断实现技术突破。联创超导一直潜心研发，深耕高温超导技术，是国际上为数不多的高温超导应用技术综合性解决

方案提供商。近年来，联创超导陆续在可控核聚变领域获得突破性进展，先后完成了REBCO集束电缆及高温超导磁体的设计，于2023年8月完成了国际首根百米级大电流高温超导电缆的研制，并成功应用于磁体的研制。此次基于集束电缆的D型超导线圈的研制和低温实验也验证了集束电缆设计与制造工艺的可行性。同时，这也标志着联创超导已经具备了用于大型高温超导磁体的综合性设计和批量化制备能力，具备为紧凑型聚变堆、强磁场装置、高场磁共振、超导储能等大型超导装备研制和产业化提供先进可靠超导技术与

### 六、强化组织实施

(十四)加强组织领导。坚持和加强党对数据工作的全面领导。在党中央集中统一领导下，各地区各部门要强化组织实施，结合实际抓好本意见贯彻落实。国务院办公厅强化工作协调，统筹推进政务数据共享工作。国家数据局加强工作统筹，动态掌握全国公共数据资源开发利用情况，及时协调解决工作中的重要问题。重要情况及时按程序向党中央、国务院请示报告。

(十五)强化资金保障。加大中央预算内投资对数据基础设施、数据安全能力建设的支持力度。各地区各部门可结合实际需要统筹安排数据产品和服务采购经费。鼓励各类金融机构创新产品和服务，加大对数据要素型企业、数据基础设施企业的融资支持力度。引导社会资本有序参与公共数据资源开发利用活动。

(上接第一版)

### 五、统筹发展和安全，营造开发利用良好环境

(十一)加大创新激励。明确公共数据管理和运营的责任边界，围绕强化管理职责优化机构编制资源配置。在有条件的地区和部门，按照管运适度分离的原则，在保障政务应用和公共服务的前提下，承担数据运营职责的事业单位可按照国家有关规定转企改制，试点成立行业性、区域性运营机构，并按照国家有关法律法规进行管理，符合要求的纳入经营性国有资产集中统一监管。研究制定支持运营机构发展的激励政策。

(十二)加强安全管理。强化数据安全和个人信息保护，加强对数据资源生产、加工使用、产品经营等开发利用全过程的监督管理。建立健全分类分级、风险评估、监测预警、应急处

置等工作体系，开展公共数据利用的安全风险评估和应用业务规范性审查。运营机构应依据有关法律法规和政策要求，履行数据安全主体责任，采取必要安全措施，保护公共数据安全。加强技术能力建设，提升数据汇聚关联风险识别和管控水平。依法依规予以保密的公共数据不予开放，严格管控未依法依规公开的原始公共数据直接进入市场。

(十三)鼓励先行先试。充分考虑数据领域未知变量，落实“三个区分开来”，鼓励和保护干部担当作为，营造鼓励创新、包容创新的干事创业氛围，支持在制度机制、依规授权、价格形成、收益分配等方面积极探索可行路径。充分认识到数据要素的潜在风险，坚决防止以数谋私等“数据上的腐败”，坚持有错必纠、有过必改，对苗头性、倾向性问题早发现早纠正，对失误错误及时采取补救措施，维护公共数据安全。

何立峰指出，有关部门要支持企业提高竞争力，壮大综合实力，积极拓展国内外市场；要营造良好的投资环境和创新生态，服务南疆经济社会高质量发展；要搭建兵地各族群众多层次交往交流交融平台，推进中华民族共同体建设。

中央军委委员、中央军委政治工作部主任、中央代表团副团长苗华，以及生产建设兵团主要负责同志、中央代表团全体成员参加活动。

装备的综合能力。

根据聚变行业协会(FIA)发布的《2024年全球聚变行业报告》，全球可控核聚变融资市场愈发活跃。截至2024年4月，全球可控核聚变行业所获得的总投资额已达到71亿美元，较2023年同期增加9亿美元，相比2022年同期增加23亿美元。

据专业机构测算，预计2024年全球核聚变市场规模将达到约3312.6亿美元，预计到2031年将达到4915.5亿美元，2024年至2031年的复合年增长率为5.8%。

行业人士指出，联创光电本次公告的收购方案完成后，联创超导将获得3.568亿元的发展资金，这将极大加速联创超导在可控核聚变领域高温超导磁体产业的研发和建设，助力我国尽快突破可控核聚变能源应用研究。

(十六)增强支撑能力。加快建设数据产权归属认定、市场交易、权益分配、利益保护制度。统筹数据领域标准体系建设管理，组织开展相关标准研制、宣传、执行和评价。依托国家重点研发计划、国家科技重大专项等，开展数据加密、可信流通、安全治理等关键技术研究攻关。加强数据领域人才队伍建设，将提高做好数据工作的能力纳入干部教育培训内容。积极参与国际交流合作，推动公共数据国际治理规则、国际标准制定。

(十七)加强评价监督。各地区各部门可结合实际探索开展公共数据资源开发利用绩效考核，依法依规向审计机关开放公共数据资源目录和开发利用情况。鼓励开展公共数据资源开发利用成效评价和第三方评估，加强经验总结和宣传推广，营造良好氛围。

(新华社北京10月9日电)



10月9日至11日，2024北京水展在国家会议中心举行。展会涵盖净水、环保水处理、膜与水处理等7个主题展区，展示了水处理领域的最新技术和产品。图为观众观看具有自主知识产权的净水材料中空纤维膜。 本报记者 洪星摄

## 重庆：推动西部高质量发展增长极加速崛起

(上接第一版)

通过“小切口”改革，川渝高竹新区推动实现“经济活动一体开展、社会事务分区管理”，为构建全国统一大市场探路。截至目前，新区已累计入驻企业201户，签约重大项目58个、协议引资206.6亿元，初步形成重庆汽车制造配套的现代产业集群。

“一盘棋”思维越试越活，一体化之路越走越宽。目前，川渝两地共同推进市场准入“异地同标”，311项政务服务事项实现“川渝通办”，事项累计办理超1800万件次。

### 协同共建 唱响西部“双城记”

成都向东、重庆向西，两大都市圈双向奔赴、相向发展。在重庆渝西地区，协同发展的新气象正蓬勃兴起。位于合川区的重庆火锅食材产业园，已汇聚火锅食材加工企业100余家，年产值约50亿元。产业园更是联合成渝九地签署涪江流域美食资源合作协议，成立“川渝藏”十八地火锅食材联盟，带动川渝两地相关产业共同发展。

身处双城经济圈腹心的荣昌区，则发挥“科技+畜牧”优势，以全国首个、目前唯一的畜牧单品种国家级大数据服务平台——国家级生猪大数据中心为核心，开发智慧养殖综合服务平台“猪E养”等系列数字应用，拓展四川内

### AI用于科研潜力巨大

此次诺贝尔化学奖，除了是对获奖者的表彰，也是对人工智能在基础科学研究领域深入应用的重要认可。

杨茂君认为，这次获奖的研究定义了一个理论上可以解决所有科学问题的范式，即从实际问题出发，将其转变为AI可以处理的输入数据，再经过深度学习网络，最终输出结果。

“在所有通过输入得出输出的问题上，AI理论上都可以作为有力的工具，这反映了AI在科学研究领域的广阔潜力。”在杨茂君看来，这一技术的应用范围并不限于生物、化学、物理等领域，其应用范围主要取决于如何将客观世界的问题(或数据)抽象成AI可以学习和处理的形式，以及现实世界是否有足够多的真实数据，训练和构建深度学习网络。

“AI在蛋白质设计领域的应用突破可以说是天时地利人和，水到渠成。”杨茂君解释，蛋白结构的一级序列足够简单，且蛋白质的三维结构输出也有标准的表达形式，并且在过去几十年，结构生物学领域积累了大量真实蛋白结构数据。

徐纯福也表示，AI在生物、化学、医药等健康领域的潜力才刚刚崭露头角，未来还大有发展空间。

“就拿我最熟悉的蛋白质计算设计来讲，虽然今年相关成果获奖了，但计算方法在功能蛋白的设计方面还面临很大挑战。”徐纯福说，如果进一步改进AI算法，能够更准确地设计酶、抗体等重要功能蛋白，将有可能产生具有真正实用的全新蛋白。

徐纯福同时认为，AI对科学研究重要性日益凸显，科学家一方面要积极拥抱新的研究范式，同时也要尽量规避AI的局限性。“AI不是万能的，科学家们需要扬长避短，推动AI在基础科研更有效应用。”他说，科学家要更负责任地应用AI，不用AI做违背科学伦理、有害人类健康的科学研究。

(科技日报北京10月9日电 本报记者张佳星对本文亦有贡献)

国内学者解读二〇二四年诺贝尔化学奖

本报记者 都 凡