

# 含金属复杂分子模拟速度创纪录

科技日报北京10月31日电(记者刘震)来自美国太平洋西北国家实验室以及匈牙利的科学家,在英伟达公司的高性能图形处理单元(GPU)上成功执行了量子化学计算,创造了含金属复杂分子模拟速度新纪录,为电子结构计算设定了新基准。相关论文发表于最新一期《化学理论与计算》杂志。

金属酶能够加速化学反应,降低能

耗,使反应过程更加高效和可持续。深入了解和优化这些催化剂,对于医药、新能源和消费品等诸多行业至关重要。然而,此前快速且高精度的化学计算往往难以实现。

为解决这一难题,研究团队集结最先进的硬件与量子化学张量网络算法等尖端模拟技术,在单个DGX-H100 GPU节点上,实现了每秒高达246亿次浮点运算的计算速度。

团队表示,与此前用英伟达公司的其他GPU开展的计算相比,此次计算的速度提高了2.5倍;而与用中央处理单元(CPU)进行的类似计算相比,此次计算速度更是提高了80倍。

最新研究旨在实现多体薛定谔方程的高效且精确求解。这些方程对于理解分子和材料的电子结构十分关键。目前,全球仅有少数计算系统具备

如此强大的计算能力。

团队强调,最新成果使复杂化学系统的研究能够快速改进和迭代,充分展示了大规模计算在解决量子化学问题方面的潜力。此外,更出色的GPU计算框架,以及人工智能引导的物理学,结合为大型定量机器学习模型生成训练数据的新方法,有望为实现能源、健康等领域的新应用贡献重要力量。



研究人员正在进行细胞培养。  
图片来源:西班牙巴塞罗那基因组调控中心

科技日报北京10月31日电(记者张佳欣)《科学》杂志31日发表了一项由西班牙巴塞罗那基因组调控中心团队完成的重要成果。他们成功绘制出人类剪接体的第一个详细结构图谱,为理解这一复杂且精密的分子机器提供了新视角,并为开发新的治疗方法铺平了道路。

剪接体被称为细胞内的“剪辑大师”。它的主要职责是在DNA转录过程中精细地编辑遗传信息,从而使单个基因能够编码不同版本的蛋白质。据估计,大约90%的人类基因需要经历剪接体的加工。如果在剪接过程中出现问题,可能导致多种疾病的发生。

尽管人类基因组中仅有大约2万个蛋白质编码基因,但通过剪接机制,产生的蛋白质种类可以增至这个数字的好几倍,有些估算认为可达10万种以上。为了研究剪接体功能,科学家调整了人类癌细胞内305个与剪接体有关基因的表达水平,并观察了这些变化是如何影响基因组剪接的。

研究揭示了剪接体内部各组成部分的独特调控功能,发现剪接体的核心蛋白不是被动而是主动参与决策,确定遗传信息如何被处理,进而影响到蛋白质的多样性。例如,有的剪接体负责识别要删除的RNA片段,有的则确保在正确的位置进行切割,还有一些则起到保护作用,防止其他组件提前行动干扰未完成的工作。

研究还显示,剪接体是一个高度互联的系统,对任何一个组件的干扰都可能引起广泛的影响。科学家认为,癌细胞对于这种高度互联的剪接网络的依赖可能是其致命弱点。通过干预剪接过程,有可能将癌细胞置于无法适应的状态,导致其自我毁灭。这一发现为未来的癌症治疗提供了新的思路。

人体内的每个细胞都依赖DNA发出的精确指令才能正常运作。这些指令被转录成RNA,随后经历一个至关重要的编辑过程,这就是剪接。包括癌症在内,许多疾病都是由剪接错误引起的,而新的剪接体图谱可以帮助人们准确确定患者细胞中出错的位置。我们很高兴地看到,纠正剪接错误的药物,正在改善脊髓性肌萎缩症等罕见疾病的治疗。如今有了这份新图谱,新疗法将有望应用到对其他疾病的治疗中。

## 人类首张剪接体结构图谱绘出

为理解复杂精密分子机器提供新视角

总编辑 卷点  
全球科技24小时  
24 Hours of Global Science and Technology

## 人工智能正推动产业模式改变

科技创新世界潮 371

◎本报驻法国记者 李宏策

随着人工智能(AI)技术的不断进步,其在各行业的应用日益广泛。从优化农业生产到提升商业效率,AI正逐步改变着传统作业模式。学术界与产业界的合作,也在推动着这一变革。

“嗨!巴黎”人工智能研究中心和巴黎HEC商学院主办的“2024HEC数字创新与分析高峰论坛”上个月稍早时间在巴黎举行。来自欧洲、美国和亚洲的学者及企业高管们,开始深入探讨AI在商业领域的最新应用以及AI未来的发展前景。

### AI在农业中发挥重要作用

论坛上,路易达孚集团数据科学与分析主管亚历克斯·雷赫瓦在“利用数据和AI服务未来农业”的主题报告中指出,AI正在并将继续在农业中发挥不可或缺的重要作用。



李喜彤教授介绍研究成果。本报记者 李宏策摄

路易达孚集团是一家全球领先的农产品贸易与加工企业。它利用数据科学将农作物监测、天气、交易、可持续性、物流、业务优化等多方面信息进行系统的数字化,借助AI技术全面综合分析,从而对种植、销售、物流和仓储等决策提供优化建议。

以橙子种植为例,通过抽样监测果树,借助新的AI模型,整合多方面影响橙子产量的外界因素,该集团能够提前11周作出更为精准的作物预测。

在天气预测方面,AI能够在宏观尺度提前预测气候风险,从而指导种植决策规避灾害天气影响,并能够对农作物价格波动进行预测。在较小尺度上,AI可以更为准确的评估和预测早期霜冻等风险。AI还可以对特定河流的水位状态进行监测和预测,并为特定地区提供种植决策。

初创公司EASY24数据主管鲁本·维斯卡诺介绍了AI如何帮助酒庄、批发商和终端商户之间建立更高效的采购模式,并由此催生新的商机。

维斯卡诺表示,酒庄和批发商提供的产品清单没有统一格式,有的是文字文件,有的是图片文件,还有的是口述录音。以前,不同类型的信息源很难统



阿宁迪亚·高什教授正在作报告。本报记者 李宏策摄

一处理,但随着通用AI技术的发展,这些信息都能够被AI理解,并在短时间内生成统一的格式。利用这一技术,EASY24在生产者和销售者之间建立起信息平台,从而解决了双方难以取得及时联系的痛点。

### AI优劣还需更深入研究

AI飞速发展,人们对其评价趋向两端。乐观主义者认为,AI具备巨大的潜力,将改善社会的各个方面。悲观主义者则担心AI的发展会带来负面影响,如失业和不可控的技术滥用。

纽约大学斯特恩商学院阿宁迪亚·高什教授发表了题为“与AI共同发展,构建AI之屋以获得竞争优势”的讲座。高什表示,相较于电力和计算机等传统通用技术,AI更为复杂,在本质上具有不确定性。人们需要更深入地理解人类相对于机器和算法的优势与劣势,从而找到能充分发挥AI作用的领域,让AI成为人类智能的有力补充。

高什认为,AI存在的偏见问题往往源于反映历史社会行为的数据生成过程,责任不在AI,而在于人类自身。AI去偏算法的新发展将能够应对这些

问题。高什说,AI技术本身并不是问题,反而是解决各种社会问题的关键。

### 搭建交流平台追踪AI进展

巴黎HEC商学院的李喜彤教授是本次论坛的发起者和组织者,同时也是“嗨!巴黎”人工智能研究中心的研究员,人工智能领域专家。他在接受科技日报记者采访时表示,此次论坛是“嗨!巴黎”人工智能研究中心的一次学术尝试,旨在搭建一个学术界和企业界交流AI技术和应用的高端平台,通过汇集欧洲、美国和中国的顶尖学者与头部企业,从多角度把握AI发展的前沿态势。

“嗨!巴黎”是法国政府重点打造的人工智能研究中心。2024年5月,马克龙总统在爱丽舍宫会见法国人工智能领域顶尖人才,并决定为该项目再次注资7000万欧元,以支持其在AI人才发展和创新方面发挥驱动作用。

李喜彤表示,未来计划以每年一届的模式持续举办人工智能主题论坛,并将持续追踪伴随AI高速发展的商业应用和社会影响。

## 2.83亿像素合成图“捕捉”到黑狼星云

科技日报北京10月31日电(记者张梦然)欧洲南方天文台(ESO)献上了一份特别的礼物:一张名为“黑狼星云”的神秘宇宙图像。这张照片由位于智利的帕拉纳尔天文台的VLT巡天望远镜拍摄,以2.83亿像素的超高分辨率记录下这片星云在五彩斑斓的宇宙背景下的独特轮廓——仿佛一只潜伏在夜幕中的狼,正伸出爪子准备捕捉路过的行人。

黑狼星云隐藏在夏季星座天蝎座之内,距离地球大约5300光年之遥。这片星云实际占据的天空面积相当于四个满月的大小,而它只是更大星云Gum 55的一部分。

黑狼星云是由极为密集的宇宙尘埃组成的寒冷区域,这些尘埃遮蔽了背后的星光,仅允许红外线等较长波长的辐射穿透。这些尘埃云团虽然冰冷,但通常是新诞生的地方。

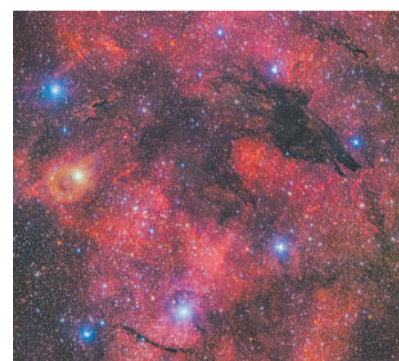
黑狼星云之所以能在星空中显形,是因为它与周围明亮的星云形成了鲜明对比。这张照片以惊人的细节展现了这只“狼”如何从其后方那些正经历着恒星形成的辉光云层中脱颖而出。那些五彩斑斓的云朵主要是由氢气构成,并受到新生恒星强烈紫外线辐射的影响而呈现出红色。

虽然有些黑暗星云,比如著名的煤炭星云,可以凭借肉眼观察到,但黑狼星

云则需要借助现代天文设备才能显现。

这张照片是利用VLT巡天望远镜(VST)获取的数据合成的。为了得到这张照片,ESO团队结合了多个时间点拍摄的图像,每个图像都经过特定的滤镜处理来捕捉不同颜色的光线。所有这些图像都是在VST南银河平面和光度H $\alpha$ 巡天(VPHAS+)过程中收集的,该调查已经记录了银河系中超过5亿个天体的信息。

此类调查不仅帮助科学家更好地理解银河系中恒星的生命历程,而且这些数据还通过ESO的科学门户向公众开放,鼓励人们共同探索这些隐藏在宇宙深处的秘密。



星云在五颜六色的发光气体云背景下,营造出“黑狼”的轮廓。  
图片来源:ESO/VPHAS+团队

## 首座无化石钢建筑明年底竣工

科技日报讯(记者刘震)据美国趣味工程网站近日报道,瑞典钢铁制造商SSAB和芬兰智能建筑公司Parmao携手,设计了全球首座完全采用无化石钢建造的概念建筑。该项目预计于2025年正式动工,并于同年底竣工。这标志着人类向建造出更可持续建筑的目标迈出重要一步。

无化石钢,是一种在生产过程中不使用化石燃料生产的钢。传统炼钢工艺利用煤炭和焦炭等化石燃料,加热铁矿石并将其转化为钢铁。这些化石燃料燃烧时会向大气中释放二氧化碳,加剧气候变化。

最新项目用的无化石钢得益于

HYBRIT技术。HYBRIT技术使用绿氢等无化石能源成功替代了煤炭和焦炭,实现了钢铁制造行业的二氧化碳零排放,且副产品仅为水。2024年8月,SSAB公司宣称,他们利用HYBRIT技术成功生产出无化石钢,并可以进行工业化生产。

粗略估算表明,HYBRIT技术有望将瑞典的二氧化碳净排放量减少10%以上。

SSAB公司表示,借助HYBRIT技术,他们可以消除传统炼钢过程中产生的碳排放,显著降低建筑材料对气候的影响。最新合作展示出无化石钢在建筑行业的潜力。

### 创新连线·欧洲

## 2024中英科技峰会成功举办

第四届中英科技峰会本月稍早时间在伦敦肯辛顿市政厅举办。本届峰会以“共译·共创·共进”为主题,获得了来自中国、英国、北美、澳洲和欧洲的多家合作机构的支持。

中英科技峰会是一个非营利性、独立运营的国际大型活动。峰会组委会由全球各高校学者组成。本次峰会从人工智能、智慧城市、生命科学、创新创业四个角度,邀请众多行业内重磅嘉宾进行会谈讲座,为在英学者拓展学术思考,搭建合作桥梁。

中国驻英国大使馆科技公参丁明勤在会上表示,中英科技合作优势互补,中英合作提升了两国的科研能力

和生产动力,为双方提供了新的发展机遇。两国在绿色低碳技术、先进农业、抗生素耐药性研究、生物多样性、创业等领域合作潜力巨大,相信中英科技创新合作将在应对气候变化、公共卫生、粮食安全等全球性挑战中发挥越来越重要的作用。

本次活动同时举办了主旨演讲、学术论坛、创新设计展览、科技展览、初创项目路演、科技企业展示及校园招聘等多项活动,同时在B站和Youtube同步直播,吸引了线上线下观众同时参与。

(本栏目稿件来源:《欧洲时报》编辑整理:本报驻法国记者李宏策)

## 蝙蝠如何实现千米级夜行导航

### 科普园地

◎本报记者 张梦然

想象一下,在伸手不见五指的漆黑夜里,只有一支小小的手电筒,你能否立刻辨认出自己的位置,并从一个半径3公里的任意点找到回家的路?对于大多数人来说,这是几乎不可能完成的任务。但对于那些夜空中飞翔的蝙蝠而言,这简直就是小菜一碟。

最近,《科学》杂志上的一篇研究报告揭示了一个令人惊叹的事实:那些使用回声定位的蝙蝠们,居然拥有一种特殊的“超能力”——能够在漆黑的夜晚里,仅凭回声定位就能完成千米级别的

导航。换句话说,即便是被人地挪到千米之外,它们依然能够迅速而准确地找到回家的路。

这其中的奥秘,是由德国和以色列科学家联手揭开的,他们选择在以色列的胡拉谷进行实验,对象是重仅6克的库氏伏翼蝙蝠。

为了追踪这些小家伙的行踪,科学家给每只蝙蝠都贴上了一枚名为ATLAS的微型反向GPS跟踪装置。这种装置可以提供高分辨率的实时位置信息,帮助科学家了解蝙蝠究竟如何找回家。

在连续几个夜晚里,科学家跟踪了76只蝙蝠的活动轨迹,它们都被迁移到了距离巢穴最远达3公里的不同地点。但大多数蝙蝠依然能在短短几分钟之内成功返回自己的家。即便是在

完全黑暗的情况下,仅依靠回声定位这一种方式,也有高达95%的蝙蝠能够顺利找到回家的方向。

科学家们注意到,蝙蝠似乎特别偏好那些声学信息更加丰富的区域飞行。这样的地方通常会提供更多的回声反馈,帮助它们更好地理解周围环境。而在寻找归途的过程中,蝙蝠会展现出一种独特的飞行模式:先是进行一些曲折的飞行,似乎在确认自己的位置;接着,就会做出判断,调整路线径直朝家的方向飞去。这表明,这些小家伙实际上是在大脑中构建了一个属于它们自己的“声学地图”,并利用这个地图来进行导航。

尽管蝙蝠们已经展现出卓越的回声定位能力,但在条件允许的情况下,它们还是会利用视觉来辅助导航,以进

一步提升定位精度。这一发现不仅让人们对这些夜间飞行者的生存技能有了更深的认识,同时也为人们开发新的导航技术,提供了宝贵的启示。



库氏伏翼蝙蝠。  
图片来源:研究团队