

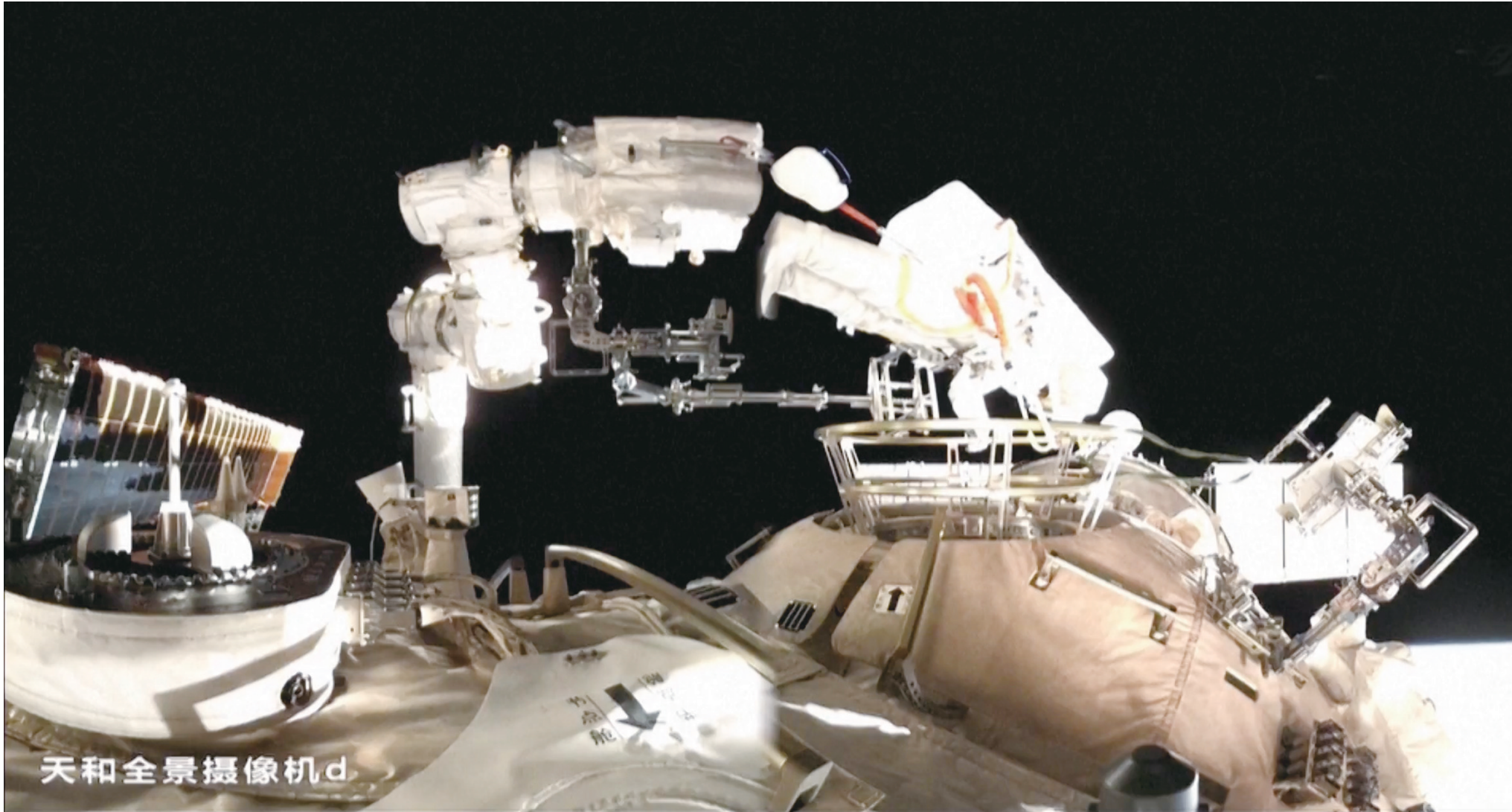
2021年12月28日
星期二
总第385期
今日8版

科技日报社主管主办
科普时报社出版
国内统一连续出版物号
CN11-0303
代号1-178

科技创新、科学普及是实现创新发展的两翼，要把科学普及放在与科技创新同等重要的位置。没有全民科学素质普遍提高，就难以建立起宏大的高素质创新大军，难以实现科技成果快速转化。

——习近平

科普全媒体平台 中国科普网 www.kepu.gov.cn 投稿邮箱:kepushibao@kepu.gov.cn



12月26日晚，航天员叶光富、翟志刚先后从天和核心舱节点舱成功出舱，后续将协同开展空间站舱外全景相机C抬升、自主携物转移验证等操作。期间，驻守舱内的

王亚平配合支持两名出舱航天员开展舱外作业。

视觉中国供图

AI 蛋白质结构预测再下一城 国内首次复现 Alphafold2 全规模训练并开源代码

□ 科普时报记者 崔爽

近日，由国内团队研发的蛋白质结构预测工具Uni-Fold问世，该团队还开源了训练、推理代码，为本就热火朝天的AI蛋白质结构预测领域再添一把柴。

由深势科技研发的Uni-Fold成功复现了曾引起生物学界轰动的AlphaFold2的全规模训练，Uni-Fold克服了Alphafold2未开源训练代码、硬件支持单一、模型不可商用等局限性，在训练与推理环节进行了GPU上的适配，性能优化、功能完善等工作，为更多人参与这一领域提供了基础。

“开放产品，也开放流水线”

蛋白质折叠问题被认为是人类在21世纪需要解决的重要科学前沿问题之一。研究蛋白质结构，有助于了解蛋白质的作用，理解蛋白质如何行使其生物功能，认识蛋白质与非蛋白质之间的相互作用，对于生物学、医学和药学等都非常重要。

2020年，人工智能为蛋白质结构预测领域带来惊人进展：在2020年的国际蛋白质结构预测顶级竞赛CASP14上，谷歌旗下的人工智能公司DeepMind推出的AlphaFold2预测的大部分结构准确度均与实验足够接近，远超此前所有方法。它的预测也将17%的结果一举提高到58%，因为无固定结构的氨基酸比例很大，58%的结构预测已经

趋近极限。

这一结果标志着蛋白质单体的结构问题在一定意义上得到了解决，也让蛋白质结构预测这一领域成为人工智能落地的热门。

今年7月，DeepMind宣布开源Alphafold2模型的推理代码，再次引发业界震动。

不过，在深势科技创始人兼CEO孙伟杰看来，AlphaFold2的开源并不能让相关领域研究人员高枕无忧，原因在于其训练代码并未被公布，且模型不可商用。

孙伟杰说，如果一味依赖AlphaFold2，不仅会使研究受到掣肘、阻碍进一步工作，也会让国内研究者在这一热门技术领域失去先机。

据悉，目前已开源的Uni-Fold训练代码，经过数据异步读取、混合精度训练等优化工作，支持高效GPU训练。基于优化后的训练代码，深势科技团队实现在128块GPU上进行Alphafold2模型的全规模训练，并将持续优化所得模型。Uni-Fold的推理代码更加轻量、高效，在相同硬件环境下，可获得与公布的Alphafold2代码相比2-3倍的效率提升。

“可以说AlphaFold2开源了产品，但没有开放产品的流水线，对于训练模型来说，训练代码就是流水线，也是行业真正的技术壁垒所在。”孙伟杰解释，

“我们的复现是把训练代码、相应数据、训练过程等全部复现一遍，等于把流水线造出来并且开放给大家，全行业可以一起来应用改进、解决实际问题。”

创新研究范式，加速药物研发流程

药物研发领域以昂贵、冗长、试错空间有限、不确定性高著称。更关键的是，在行业竞争愈发激烈的今天，容易试出来的药物和材料已经被挖掘得差不多了。行业迫切地需要更好的计算模拟及设计工具，把以实验为主的研发范式，变为“计算设计-实验验证”的研发范式。

对于蛋白质水平的药物研究，本质上都可以抽象为微观原子、电子层面的相互作用问题。在实际计算中，当原子、电子等微观粒子数量增多，会陷入维数灾难，计算量随微观粒子的数量指数上升的问题。

因此，“我们开创性地提出了‘物理模型+人工智能+前沿计算方法’的科学研究新范式，开发出新一代人工智能分子模拟技术。”孙伟杰说，其基于第一性原理的计算数据，通过深度神经网络对原子相互作用势能进行参数化，构建了能够有效克服“维数灾难”的模型，解决了微尺度分子模拟中精度与效率难以兼顾的问题，突破性地实现了精度与效率的统一。

实际上，AlphaFold是纯粹的归纳式

的方法，它其实是把20亿数据和十几万个结构非常充分地融合起来，用AI大模型和算力去训练得到的结果。这也注定了它的局限性：越是传统实验室数据充足的部分，它表现越好，而在那些未解的结构和冷冻电镜等擅长的结构方面，由于数据的缺失，AlphaFold2预测的表现不尽人意。比如在蛋白和蛋白相互作用方面，有效的实验数据只有1万个，如果纯粹通过把这些数据学会的方式去做预测，难度更大，置信度也更低。

孙伟杰坦言，人工智能蛋白质结构预测很热门，但行业更多的还是基于归纳的范式，“更多地是用很多现实的数据去训练一个AI模型，然后去推跟它相似的道路。但是这其中有一个很重要的悖论：药物靶点、靶标的价值和它的数据成反比，真正有价值的药物靶点，都没有数据。”

“没有历史数据的靠什么，其实只能靠物理模型。”孙伟杰说，还是要从底层做起，用AI+物理模型计算，再去求解药物设计中的很多通用问题。

在相同的测试条件下，Uni-Fold的预测精度与DeepMind官方发布的Alphafold2模型接近。深势科技团队使用Uni-Fold对CASP14蛋白预测任务中的序列数据集进行了直接测试，平均Ca-IDDT达到82.6。可以说，Uni-Fold是“训练公开版的AlphaFold2”，而且硬件适配与效率更加优化。

考古新进展！江西发现越国王室贵族墓

□ 科普时报记者 魏依晨

12月25日，江西发布国字山墓葬考古阶段性成果，目前推测墓主人应为越国王室贵族，这是近年来江西地区东周时期考古的一次重大突破。

国字山墓葬位于江西省樟树市大桥街道彭泽村洪光塘西南，筑卫城城址西侧约300米处的小山顶部。筑卫城是清江盆地东周时期的中心性城址。城址周边发现大量同时期的城址、遗址、墓葬等，构成了以筑卫城为核心的聚落群。

自2017年起，在国家文物局的支持下，江西省文物考古研究院、中国社会科学院考古研究所和樟树市博物馆组成的国字山考古队以聚落考古的理念对墓葬及周边地区开展了持续性考

古发掘和研究工作。

据悉，墓葬虽经早期盗扰，破坏严重，在各分室内仍出土有2600余件套器物。S24室内残存有一批青铜礼器，S16内出土有3件漆鼓。墓内出土器物的种类以漆木器为大宗，此外还有金属器、陶瓷器和玉石器等。从器类看，囊括了礼器、乐器、兵器、车马器、日常用具等多种品类。礼器有铜鼎、盂、盘、匜等。乐器包括钟、鼓、琴、瑟、笙，以及编钟架、底座等，其中篆保存很好，总长度达到2.3米，是先秦时期发现的最长的一件琴。兵器有戈、戟、剑、镞、漆木盾等，其中漆盾有30余面。车马器有车书、伞盖、衡末饰和铜泡等。日常用品

包括镇、削刀、凿、帐钩等。陶瓷器包括多件印纹硬陶和原始瓷器等。S21内有一件青铜鸂鶒的跽坐人形徽。此类器物以往只见于长江下游的吴越文化区。

最为重要的是墓内出土的两件有铭铜戈(戟)。经专家考证，器主分别为越王勾践的玄孙翳(公元前410~前375年)和翳的一个儿子。

根据出土文物等推断，墓葬时代在战国中期。国字山墓葬是迄今江西地区考古发现规模最大的东周时期墓葬。墓主有着很高的身份地位，推测是越国王室贵族。国字山墓葬的发掘为构建和完善江西地区两周时期考古学文化序列

谱系提供了关键性资料。

国字山墓葬与筑卫城城址关系密切，从而为筑卫城城址的最终定性及探讨清江盆地两周时期聚落布局和社会结构打下了坚实的基础。

国字山墓葬有着突出的越文化因素。国字山墓葬的发掘是越国与越文化考古的新突破，对于研究越国历史有着重要的学术意义。国字山墓葬还有相当数量的楚文化因素和群舒文化因素，体现出多种文化因素交融共存的特征，对于研究作为“吴头楚尾”的江西地区东周时期的吴越楚关系、政治格局演变和“华夏化”进程等具有极为重要学术价值。

科普时报讯(记者侯静 通讯员张未 刘庆丰)记者从国家航天局获悉，12月26日11时11分，我国在太原卫星发射中心用长征四号丙遥三十九运载火箭，发射资源一号06星。卫星顺利进入预定轨道，发射任务圆满完成。该星即5米光学卫星02星，将进一步推进我国陆地资源调查监测卫星业务系统化应用。

5米光学卫星02星是《国家民用空间基础设施中长期发展规划(2015-2025年)》中的一颗业务星，运行于太阳同步轨道，主要载荷为可见近红外相机、高光谱相机和红外相机。卫星发射质量约2500千克，在轨可获取优于5米全色、10米多光谱以及30米高光谱图像数据，形成具有中等空间分辨率、高光谱分辨率、高时间分辨率的陆地资源遥感观测能力。

国家航天局负责5米光学卫星02星工程组织管理，国家航天局对地观测与数据中心负责工程总体工作，自然资源部作为牵头用户部门负责应用系统建设与推广，资源卫星应用中心和中科院空天信息创新研究院负责地面系统建设和运行。投入使用后，它将与5米光学卫星01星组网运行，将可见近红外相机国土区域重访时间由3天提升为2天，有效提高观测时效性，实现高效全球观测，满足现阶段我国自然资源监测与调查、地矿勘测、地质环境监测等业务对中分辨率遥感数据的需求，并服务于减灾、环保、住建、交通、农业、林业、海洋、测绘等行业。

据悉，此次任务是长征系列运载火箭的第403次飞行，还搭载了一颗科普小卫星，用户为北京一零一中学。卫星配置了小型成像相机、智能处理设备、半导体温差发电实验设备等载荷，投入使用后将开展辅助地理教学、科学技术试验等中学生科普活动，作为中非“希望”科普合作计划的重要组成部分，将助力搭建中非中学生航天交流平台，探索科普教育中非航天合作新模式。



责编:侯静
编辑部热线:010-58884122
发行热线:010-58884190
印刷:中国青年报社印刷厂
印厂地址:北京市东城区海运仓2号



中国科普资源微信公众号 欢迎訂閱科普时报

我国成功发射资源一号06星