

人工智能科研机器要来了？

几分钟成功复现诺奖成果

今日视点

◎本报记者 张梦然

人工智能(AI)复现一项诺贝尔化学奖成就,需要多久?

答案:4分钟。这甚至比阅读这篇文章的时间都短。而且AI无需反复实验,一次就成功。

这个由GPT-4驱动的“AI化学实验室”,被命名为“Coscientist”,由来自美国卡内基梅隆大学和翡翠云实验室的研究团队共同创建。相关研究结果发表于最新一期《自然》杂志上。

有评论称,自此之后,人类探索化学世界的方式,可能产生巨大革新。

AI自己学习做实验

Coscientist结合了大型语言模型、互联网和文档搜索的能力。它首先从互联网、文档数据等来源检索化合物的公开信息;然后通过学术期刊、维基百

科、美国化学会等途径进行学习;最后根据学到的信息指导自己的行动,设计、规划和执行真实世界的化学实验。

系统以GPT-4为基础,可通过调用4个命令(谷歌、Python、文档和实验)来规划实验。除了最后一个执行命令外,谷歌命令负责在互联网上进行搜索,Python命令负责执行代码,而文档命令则负责检索和总结必要的文档,这些命令还可以执行子操作。

研究团队对Coscientist的表现进行了多轮测试。其中,为了检验它设计化学反应流程的能力,团队要求它通过检索与学习,分别生成阿司匹林、对乙酰氨基酚和布洛芬等药物分子。

4分钟做个诺奖研究

研究团队对Coscientist的最终考验,是让它复现诺奖研究。

2010年,诺贝尔化学奖授予3位化学家,以表彰他们提出钯催化交叉偶联反应。这类反应的实用度非常高,因为其可高效构建碳-碳键,轻易生成许多



卡内基梅隆大学的云实验室。

图片来源:卡内基梅隆大学

难以合成的物质。在制药领域,这类反应可以在炎症、哮喘等多类疾病的新药开发中展现实力。而在电子工业、先进材料等领域,钯这类反应也能得到广泛应用。

Coscientist交上的答卷非常漂亮。在确定两种反应所需的化合物之后,它准确计算了所需的剂量,并对移液机器人进行自主编程来开启反应。整个过程只用了不到4分钟。结果,反应后的透明液体样本中成功发现了目标产物,对样本的分析也表明复现成功。

“自动化科研”即将到来

这项成果表明,人类已能有效地利用AI提高科学发现的速度和数量,并可改善实验结果的可复制性和可靠性。

论文通讯作者、美国卡内基梅隆大学研究人员盖比·葛姆斯表示,人们可拥有自主运行的系统,去发现新的现象、新的反应、新的思想。而科学中的尝试、失败、学习和改进的迭代过程,可

通过AI大大提速。这本身就是一场巨大变革。

美国国家科学基金会化学部主任戴维·伯科茨认为,该团队成功构建了一种高效的“实验室伙伴”。将各个组成部分巧妙地融合在一起,最终的成果远远超越了各个部分单独的贡献。

在同时发表的新闻与观点文章中,葡萄牙里斯本大学药学院阿娜·劳拉·迪亚斯和迪亚戈·罗德里格斯认为,Coscientist是人类朝着建立自动化实验室迈出的关键一步。

不过,研究人员也指出,Coscientist尚有一些局限性。例如,它有时会做出化学反应不正确的情况。但目前它可通过使用复杂的提示策略(如思维链和思维树)以及增加化学数据进行自我纠正。

还需要注意的是,现实世界中的研究问题,很多都比这一研究中的实验复杂得多。有些研究涉及化学以外的学科概念,如药物开发中需应用到生物学。Coscientist目前还无法解决这一领域的复杂问题。



人工智能进行化学研究的概念呈现。

图片来源:美国国家科学基金会

固态钠电池实现创纪录金属循环率

科技日报讯(记者张佳欣)美国马里兰大学研究人员开发出一种固态钠电池架构,其性能优于目前的锂离子电池。通过使用钠金属作为负极以

电解质,降低了易燃性风险。相关研究发表在新一期《能源与环境科学》杂志上。

锂离子电池在储能行业占据主导地位,但锂的可获得性有限,其能否一直保持这一领先地位让人担忧。相反,由于海洋中的盐分极其丰富,钠离

子电池提供了一种更可持续的选择。这有可能为快速增长的能源存储需求提供一种更低成本的替代方案。

目前,大多数钠离子电池都包含液体电解质,存在易燃性风险。此次,研究人员开发的固态钠电池架构基于钠超离子导体材料。钠超离子导体是

不可燃的固态电解质,具有高离子导电性和优异的化学和电化学稳定性。

研究人员成功展示了高电流密度下的稳定钠循环,以及薄3D结构离子传导固体电解质的全电池循环。这是可持续和更经济的能量存储技术的重要进步。

新型抗体或能对抗多种流感病毒

科技日报讯(记者刘震)美国匹兹堡大学医学院科学家在人类血液中发现了一类以前未被识别的抗体。这种免疫系统蛋白似乎能中和多种形式的

流感病毒。最新研究或是开发靶向季节性病毒且能提供广泛保护性疫苗的关键。相关论文刊登在12月21日出版的《公共科学图书馆·生物学》杂志上。

研究团队解释称,流感疫苗促使免疫系统产生抗体。该抗体可与入侵的流感病毒外部的血凝素病毒蛋白结合,阻止其进入人体细胞。不同的抗体以不同方式与血凝素的不同部分结合,但血凝素本身会随着时间的推移而进化,产生可躲避旧抗体的新流感病毒。因此,医药厂商每年都会根据对最主要毒株的预测提供新的流感疫苗。

鉴于此,研究人员正开发能同时抵御多种毒株的流感疫苗,并重点关注能同时抵御H1和H3流感亚型的抗体。这两种亚型包含多种毒株,是造成人们广泛感染的原因。

在最新研究中,霍利·西蒙斯团队在血凝素构建域序列中的一些H1菌株

中发现了一个微小变化——133a插入。研究显示,某些能中和H3的抗体也能中和H1。但如果血凝素发生上述微小变化,则该抗体不能中和H1。

在对患者血液样本开展的一系列实验中,团队发现了一类新抗体。试验显示,无论是否出现133a插入,该抗体都能中和某些H3毒株和某些H1毒株。而独特的分子特征使这些抗体与其他能中和H1和H3毒株的抗体不同。

研究团队指出,人们需要每年接种一次流感病毒疫苗,以跟上病毒持续进化的步伐。最新研究表明,人类有可能产生强大的抗体反应,中和不同的H1N1和H3N2病毒,这为设计更好的疫苗应对流感病毒开辟了新途径。



甲型流感病毒的概念图。

图片来源:美国趣味科学网

国际要闻回顾

(12月18日—12月24日)

前沿探索

科学家揭示一种致癌蛋白的秘密 西班牙和英国研究人员已全面鉴定了在蛋白质KRAS中发现的变构控制位点。这些正是药物开发中备受关注的靶点。新发现或有助控制癌症中的这些关键蛋白。该研究提供了KRAS的第一个完整控制图谱。

科技聚焦

新型类脑晶体管模仿人类智能 美国西北大学、波士顿学院和

麻省理工学院研究人员从人脑中汲取灵感,开发出一种能够进行更高层次思维的新型突触晶体管。其可像人脑一样同时处理和存储信息。在新的实验中,研究人员证明晶体管对数据进行分类的能力,超越了简单的机器学习任务,并且能够执行联想学习。

“最”案现场

最具希望高温超导二极管或出现 几十年来,超导体一直是物理学界研究的热点。但这些允许电子完美

无损流动的材料,通常只在非常低的温度下(比绝对零度高几度)才表现出这种量子力学特性。美国哈佛大学研究团队展示了一种新策略,可制造和操纵铜酸盐高温超导体,为在以前无法获得的材料中设计新的超导形式扫清了道路。

蓦然回首

人类和鲸鱼之间首次成功“对话” 美国科学家近日利用水下扬声器与一头名叫吐温的座头鲸成功“交谈”,并记录了回传给座头鲸的“联系

电话”。研究团队表示,这种人类与座头鲸之间的“对话”,为人类未来与地外生命交流提供了宝贵经验。

科技快讯

AI开始预测人类生活多个方面?

丹麦技术大学团队发表的一项研究,描述了一个机器学习方法。该方法能从不同方面准确预测人类生活,包括早死可能性和个性的细微差异。该模型或能提供对人类行为的量化认知。

(本栏目主持人 张梦然)

“飞龙”机器人可远距离灭火

科技日报讯(记者张佳欣)据12月22日出版的《机器人与人工智能前沿》报道,日本东北大学研究人员发明了一条“飞龙”,它会用喷水来灭火。这种新型机器人被称为“龙消防员”。

研究人员设想,世界各地的机器人专家可通过开源论文来设计机器人,并打造自己的“龙消防队”。

新研究展示的是一个4米长、可远程控制的飞行消防软管机器人原型。该机器人的设计目的是,通过直接接近火源来安全高效地扑灭建筑物内的火灾。

“龙消防员”的消防水带由其头部等部位喷出的8个可控水柱推动。它可在距地面2米的高度“飞行”。消防水带可改变形状并朝向火焰,由后方的轮式推车中的控制单元控制。这辆推车通过供水管连接到一辆装有1.4

万升水箱的消防车上。喷嘴以每秒6.6升的速度喷水,压力高达1兆帕斯卡。软管的顶端包含一个传统热成像摄像头,其有助于找到发生火灾的位置。

不过,该机器人设计仍有局限。如对“龙消防员”的被动减振机制仍未落实,这导致其准备飞行的时间过长。在户外应用中,火灾产生的热量会导致包裹水管和电缆的波纹管产生变形。



“龙消防员”在日本福岛举行的世界机器人峰会开幕式上进行表演(资料照片)。图片来源:日本东北大学田所实验室

“欺骗”大脑产生饱腹感 内服振动胶囊有望治疗肥胖

科技日报讯(记者张佳欣)当人们饱餐一顿,胃会向大脑发出信号,从而让身体意识到是时候停止进食了。现在,美国麻省理工学院工程师利用这一原理设计出可在胃内振动的可服用胶囊。这种振动会激活与感知胃扩张时相同的伸展感受器,从而产生一种虚幻的饱腹感。该研究发表在12月22日的《科学进展》杂志上。

研究人员设计了一种复合维生素大小的胶囊,其中包括一个振动元件。当这种由小型氧化银电池供电的胶囊到达胃部时,酸性胃液会溶解覆盖在胶囊上的凝胶膜激活振动马达。一旦胶囊开始振动,它就会激活

伸展感受器,通过刺激迷走神经向大脑发送信号。研究人员跟踪了设备振动期间的激素水平,发现它们反映了饭后的激素释放模式。

研究发现,在进食前20分钟服用该胶囊,可刺激发出饱腹感的激素释放,从而将食物摄入量减少约40%。

目前版本的胶囊被设计为在到达胃部后振动约30分钟。研究人员计划对其进行改造,使其在胃内停留更长时间,以便根据需要可无线打开和关闭。在动物研究中,这些胶囊在四五天内就会通过消化道排出,且实验动物没有表现出任何阻塞、穿孔或其他副作用的迹象。