

阿尔法“再下一城” 结构生物学家有望被“解放”

■本报记者 张双虎

继阿尔法围棋(AlphaGo)战胜职业围棋选手李世石后,人工智能(AI)再下一城,这次它将“目光”锁定在结构生物学。近日,在国际蛋白质结构预测赛(CASP)中,谷歌旗下DeepMind团队的阿尔法折叠(AlphaFold 2)摘得桂冠。在CASP的一系列测试中,AlphaFold 2斩获92.4分,在最具挑战的自由建模蛋白质测试中也获得87分,预测蛋白质结构的准确率甚至可以与实验方法媲美。

一时间,AlphaFold 2被“颠覆”“革命性突破”“诺奖级成果”等词汇围绕。有人称其解决了“困扰生物学家50年的问题”,有人担忧“结构生物学家是否会因此失业”。

人工智能再次完胜人类,究竟意味着什么?

AI 破解生物学难题

人体内有成千上万种不同的蛋白质,蛋白质的功能很大程度上取决于其独特的结构。弄清楚蛋白质的折叠形状被称为“蛋白质折叠问题”。在过去50年中,这一直是生物学的重大挑战。

此前,生物学家主要利用X射线晶体学或冷冻电镜等实验手段来破译蛋白质的三维结构,但这类方法耗时、成本高。

预测蛋白质结构的CASP竞赛始于1994年,今天它已成为该领域交流新技术的国际平台。2018年,DeepMind团队推出AlphaFold 1参加第13届CASP竞赛,并取得不俗的成绩。今年参赛的系统是新版本的AlphaFold 2,此次比赛中,AlphaFold 2以高分领先,高出第二名25分。

CASP竞赛创始人之一、美国马里兰州大学教授约翰·蒙特认为,人工智能预测蛋白质结构的结果与实际对照,达到90分即可与人类实验方法获得的结果媲美。美国密苏里大学哥伦比亚分校讲座教授许东认为,AlphaFold 2可以满足95%以上的理解功能、实验设计等需求,达到了应用的标准。

夺冠当日,DeepMind在官网发布新闻稿称,对于困扰生物学家50年的“蛋白质折叠”难题,AlphaFold 2已成为业内专家认可的解决方案。《自然》新闻评论更是以《它将改变一切》为题,指出DeepMind在解决蛋白质结构问题上“迈出一大步”。

12月6日,在智识学研社与智源社区策划的“智²平方”论坛中,中国人民大学



AlphaFold 让结构生物学家从业者从现有结构解析手段对时间、环境的高要求中解放出来。
图片来源:Unsplash

数学科学研究院教授龚新奇表示,在结构生物学领域,测蛋白质序列很容易,解析蛋白质结构很困难。AlphaFold的出现,验证了人工智能解决这一难题的可能性,这是一项突破。人类对蛋白质结构了解得越多,对生命科学、药物研发等的贡献越大。

清华大学生命科学学院教授王宏伟认为,这有可能为结构生物学的从业者带来“解放”:从业者不再受制于现有结构解析手段对时间、环境的高要求,能够很快拿到某个蛋白质的结构,以尽快探讨结构生物学的核心问题。

人机协同的结果

AlphaFold 1参加第13届CASP竞赛后,DeepMind团队在《自然》杂志发表文章,公开AlphaFold 1的代码。目前,DeepMind团队还没有发表关于AlphaFold 2的论文并公布相关数据,只在官网公布了相关消息就引起AI领域和生物学家们的轩然大波。

“AlphaFold 2的相关文章还没有看到。以我对Alpha系列的了解,应该还是集成数据驱动机器学习诸多算法的创新应用之一。”浙江大学人工智能研究所所长吴飞告

诉《中国科学报》,“这相当于从包含了无穷多种答案的空间中,通过学习、优化、搜索等技术,找到一种合适的解决方法。”

吴飞举例说,比如人类产生“恐惧”的情绪,需要在成千上万个神经元中锁定某种组合,形成某种神经回路结构,才会在功能上产生这种情绪。人类蛋白质的组成结构非常复杂,要从海量的组合中,找到某种特定的组合非常困难。由于计算机的计算能力非常强大(可以理解为计算机的学习模式能力和穷举搜索能力强),能帮助人们从几十个结构里,找到某个特定的结构以及该结构能对应某个特点功能。

“这是一种大数据驱动的人工智能方法,是以深度学习和搜索组合优化相结合的整体应用。”吴飞说,“AlphaFold 2的成功基于算法、模型、算力以及该领域已有知识,这些元素缺一不可。”

吴飞进一步解释说,AlphaFold 2在一个具体任务中取得巨大成功,也许源于其在模型上的组合式创新。另外,DeepMind团队也收集了一批——对应的数据,即蛋白质的结构和功能——对应的数据。在算力上,因为要从无穷多的组合里,找到一个对应的功能,需要对蛋白质大数据中蕴

含的模式进行学习,对可能的答案空间进行搜索,同时提高大规模计算能力,这是人机协同的胜利。

超越人类还差一大步

“目前主流的机器学习技术还依赖于统计学习。在数据量大、人工难以靠直觉分析规律的领域,相对来说人工智能具有优势。”北京航空航天大学教授李甲告诉《中国科学报》。

吴飞也强调,在某些特定领域,人工智能拥有人类无法企及的能力,特别是在海量数据搜索为导向的领域。

“就像一颗珍珠沉入太平洋海底,人们都知道它在那里,但就是无法锁定它的具体位置。如果依靠人去寻找,可能就是一项无法完成的任务。但人工智能可以凭借巨大的存储能力、超强的搜索能力和对数据高效利用的能力轻而易举地找到它。”吴飞说。

2016年,DeepMind团队的AlphaGo战胜围棋大师李世石,曾掀起AI界和围棋界的滔天巨浪,AlphaGo也在很大程度上改变了人们对AI的认知。

在围棋比赛中,每一步都有一个“最优落子”的选择,人类不可能在大脑里把几十个落子情况都推演一遍,但是计算机就拥有这样的能力。

“AlphaFold 2和之前的AlphaGo类似,是机器学习模型的进步和算力的提升,以及‘标签数据’指导下完成的任务。”吴飞说,“即使在某些特定领域,也不能说是‘人工智能超越了人类’,而应该叫做‘人机协同完成’。”

吴飞认为,人工智能的成功基于“模式学习和模式匹配”能力。比如,人们经常用到的人脸支付功能,人工智能并非精准“识别”你的脸,而是从几十万张人脸数据中,找到与你匹配的人脸模式。如果它发现相似度超过90%,就判断是你。

如果问人工智能,“为什么认为这张脸是我?”“人工智能就是有嘴也解释不清。”吴飞说,“人工智能是某些领域中非常好的工具,可以在某项任务中节省大量人力和时间,但对这个结果的利用,还要依靠人类专家来完成。如果将这种工具和人类的优势结合,协同赋能,就能加快创新,带来科学研究上的飞跃,进而改变人类生活。”

技术创新应在市场中进行

■芯技术·芯融合——芯片应用助力北京高端制造业产业优化”决策咨询沙龙召开,与会专家围绕我国芯片的发展问题展开讨论。

与专家一致认为,国产芯片的发展一定要实现关键核心技术国产化,这不仅要加大自主研发自主创新,还要做好市场化引导,更需要集合产业势能,各方共同协作,才能真正拥有自主核心技术芯片的竞争力。芯片具有高度集成、高度机密、高度研发导向的特点。其核心设备的原材料和零部件来自全球几十个国家和数百个供应商。其中任何一个环节的短板都可能变成发展阻碍,这就需要科研人员着力加强系统创新能力,以应对快速变化的复杂创新系统。

“我国微电子技术的起步并不晚,但成果产业化过程未能赶上世界先进水平。芯片研发要以市场为导向,以企业为主体,技术创新过程应在市场环境进行,实现产学研结合。”中国科学院原副院长杨红梅说。

科学界与产业界如何深度合作实现科技成果的产业化,一直被认为是“国际难题”。

数字化转型机遇推动智能制造升级

■本报记者 郑金武

随着新一代信息技术的发展应用,尤其是5G时代的到来,制造业迎来了数字化转型机遇,而这将进一步促进智能制造的升级提效。

近日,在“创新驱动价值智能——中英产业数字化与智能制造”数博论坛上,来自中英两国智能制造科技领域的专家及企业代表,围绕产业数字化与智能制造主题,就智能制造发展升级路径、制造业数字化转型新思路及新模式进行了深入探讨。

加快布局工业互联网

回顾制造业发展状况,与会嘉宾们一致认为,5G时代到来以后,工业互联网必将成为各国未来应用开拓的主战场。

当前,全球发达国家纷纷布局工业互联网产业。德国政府基于机械、电子、自动控制和工业管理软件等方面的优势,推出了“工业4.0”国家计划。法国政府先后推出“新工业法国”和“新工业法国II”,布局数字制造、智能制造,带动商业模式变革。此外,日本政府提出《日本:制造白皮书》,英国2017年发布产业战略白皮书等。

可以预见,工业互联网作为新一代信息技术与制造业深度融合的产物,已日益成为全球新一轮工业革命的关键支撑,对未来发展产生全方位、深层次、革命性影响。

作为一家标准研发、标准技术信息服务、产品测试、体系认证和商检服务五大业务于一体的国际标准服务提供商,英国标准协会(BSI)在这方面已有相关经验。BSI大中华区战略合作总监Paulo Lopes在论坛上表示,在英国,众多传统企业通过数字化转型成为全面“智造”企业,借助物联网和人工智能等大数据技术手段,让原本冰冷的机械工厂“链接”起来。

BSI曾在英国做过一个关于传统企业在数字化转型过程中受益程度的专业调查,研究新兴技术究竟给传统生产制造过程带来了哪些“便利”。调查结果显示,“数字化”的结果不仅提高生产利润,降低人工耗损,提升客户体验,优化产品质量,同时,因为大量数据的产生

和利用,让企业生产链得以有序健康持续的运转。

这些“数据”生成的信息,让管理者可以随时掌握企业的运行状况、市场竞争力及其在全球范围内的水平。工厂的机器在大数据的“驯化”下越来越智能,防患于未然。

促进传统企业与新兴技术融合

近年来,英国能源公司伍德集团在发展中引进了数字化战略。伍德集团自动化控制智能运营负责人Preben Nielsen介绍,随着新一代信息技术的崛起,传统企业要想在全球化浪潮中占得一席之地,就要迅速精准地将新兴技术融合到自有产业,让技术服务产业,激发新动能,创造新价值。

“像物联网这样的信息技术对传统产业具有变革性作用,尤其是在增加生产效率、提升生产安全性、强化企业可持续性发展方面。”Preben Nielsen说。

全球软件及咨询公司ThoughtWorks近年来服务了不少传统企业。他们用科技驱动商业变革,针对客户数字化转型需求提供专业的技术解决方案,同样积累了丰富的产业数字化经验。

“新一代信息技术正在从‘预测’和‘重塑’两方面改造甚至颠覆传统制造业。”ThoughtWorks中国区创新总监肖然说,新兴技术问世前,单凭人力经验是无法预知很多工业情形的,比如设备失效,只能等待问题出现后才能被动解决。

但智能技术的应用,让人们可以通过数据和趋势去预测各种情形的发生可能性,从而进行动态的干预,让整个生产过程更加高效和流畅。肖然指出:“这样的应用积少成多,逐渐产生累积效应,重塑整个产业链。”

对比中英,一个有趣的现象是,得益于相对完整的第二、三次工业革命,欧美制造业的信息系统相对完善,基础较好,但在消费者互联网的发展上却落后于中国。而在中国,很多制造企业的信息系统基础薄弱,虽然消费侧的触达非常好,但连接生产侧却十分困难。肖然表示,想要真正打通产业链,



制造业数据的收集及应用还处在初级阶段。
图片来源:Unsplash

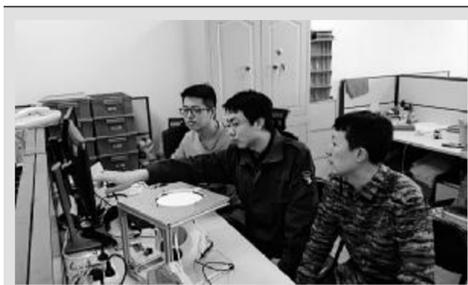
形成产业互联,中西方都面临一个共性问题,那就是如何实现消费者和工业生产全链条的互联互通。

新基建助推产业数字化

新基建概念的提出,为各行各业发展带来了新动力。工程顾问与城市咨询领域的奥雅纳(ARUP)工程咨询公司副董事汪洋表示,新基建是国家在新形势下,助力企业作出更科学的决策,从而降低企业成本,提升运营能力。

随着新基建的不断推进,新一代信息技术等前沿技术必将广泛应用于企业的各个方面。中发智造国际中心总经理杜卫滨说:“新一代信息技术产生的直接效益,使得数据传输更快,大数据的智能应用场景越来越多,诸多行业都大幅度提升了效率,释放了强大行业潜能。同时,企业及城市管理者也将以更低的成本获得精准信息,通过数据分析作出预判和决策,实现‘智’造‘智’理。”

一所人一事



田大鹏(中)等在进行工作研讨。

田大鹏

中科院长春光学精密机械与物理研究所航测三部副主任、研究员。长期从事精密运动控制理论和技术创新研究,科技部遥感中心“青年创新人才”、中科院青年创新促进会长春分会会长、吉林省自动化学会理事、IEEE-ICMA 管理委员会委员等。发表论文70余篇,授权专利17项,出版专著1部。

科技水平是一个国家综合实力的重要体现,其中航空航天领域始终是重要的高科技竞技场。中科院长春光学精密机械与物理研究所(以下简称长春光机所)研究员田大鹏一直致力于此,在航空航天领域不畏艰难,砥砺前行。

心怀祖国,只争朝夕

航空航天装备在进行正式飞行试验之前都需要进行大量的地面测试,其中半实物仿真设备是最为关键的地面验证设备。

2007年,田大鹏在北京航空航天大学跟随导师开展面向空间交会对接的地面仿真设备研制工作。当时项目任务周期短,设备需要搭载进行空间交会对接的目标飞行器上全部对接涉及到的机构和传感器,研制难度很大。在缺少类似设备研制经验的情况下,田大鹏主动承担了该设备的研制工作。

在调试过程中,设备发生了严重的谐振。为了保证设备顺利交付,最快、最准确地感知设备状态,田大鹏在设备随时可能飞车的情况下用触模和听音的办法进行分析,顺利消除了问题,使设备精度达到预期指标。

2009年,田大鹏赴日本公派留学。学习期间,他立志为祖国争光,几乎每天都泡在研究室里钻研至深夜。语言不通,他就自学日语;关键的理论不懂,他就广查资料、虚心请教。他发表的论文是同研究室日本人的两倍。回国前,他婉拒了外国导师的挽留,毅然回到祖国最需要的科研岗位上。

不畏艰难,勇于创新

长春光机所是国内最早开展航空光电成像相关研究的科研机构。由于航空光电装备要在恶劣的飞行环境中工作,因此装备要克服载机飞行过程中气动、发动机振动以及载机姿态变化的影响,必须依靠主动控制手段补偿载机的运动,使视轴稳定下来,从而获得清晰、稳定的图像。可以说,视轴运动控制性能是航空光电成像装备性能的重要决定性因素之一。

2012年,田大鹏放弃在国内一线城市工作的机会,来到长春光机所从事面向航空光电装备的精密控制理论与技术创新研究。

加入研究团队后,田大鹏大胆创新,提出了将航空光电装备运动控制的核心技术分解为信号处理、干扰抑制算法与控制结构三个方面,并逐个击破。仅仅几年的时间,他就提出了将控制领域的前沿方法引入到微分信号估计领域的新思想,丰富了相关理论。

为了解决部分航空光电装备中对多原件高精度联动的需求,田大鹏数夜难寐地反复思考,终于想到将在国外留学期间研究的双向控制方法引入到光电装备多原件协同控制的新方法。针对航空光电成像高精度视轴稳定时采用压电陶瓷执行器进行二级稳定时的非线性影响,他又提出了压电陶瓷执行器线性化符合控制方法,使视轴稳定精度达到微弧级,比以往数十微弧有了很大幅度的提升,为下一代航空光电装备的研制奠定了基础。

2016年,田大鹏带领团队参加某专项预研的研制过程中,在短短两个多月时间里就完成了整机的设计、装调。在调试过程中,他带领团队加班加点,最终解决了视轴稳定、步进扫描、三轴协同等一系列技术问题,保证了项目顺利交付。

无私分享,传播知识

田大鹏在繁忙的工作之余还积极投身到科普工作中。在出国期间,他注意到国外大学的开放活动对下一代教育有重要意义,许多孩子在进入大学研究室参观、体验之后萌发出强烈的好奇心,希望今后也能从事相关研究工作。

因此,在长春光机所工作期间,田大鹏积极参与科普普及工作。他作为中科院长春分院科普讲师团成员,在长春市的中学进行了多次科普普及讲座。

有时候,科研任务繁重,田大鹏就利用休息时间积极准备讲义,希望能够为国家的下一代带来科学启蒙,传播科学的火种。在一次接受媒体采访时,他表示,国外科学启蒙和开放活动对于科学研究的延续性具有很大的作用,国内相关工作仍然较少,特别是在东北地区,尽管长春有许多研究机构,但是面向孩子们的开放活动和科普讲座开展得还不够,希望能够持续地为科普工作贡献力量,尽自己所学,培养新一代的科研人员。

多年来,田大鹏刻苦努力、勇挑重担,从普通的科研人员迅速成长为中青年科研骨干的代表,主持或参与多项国家级、省部级科研项目,先后获得吉林省自然科学学术成果一等奖、中国科学院杰出科技成就奖和国家科技进步奖一等奖等。在未来的科研工作中,田大鹏将继续脚踏实地,为国家航空光电仪器科研事业贡献青春力量。

(作者单位:中科院长春光学精密机械与物理研究所)

记中科院长春光学精密机械与物理研究所研究员田大鹏
■管坐攀

奋斗的青春最美丽