

# 当化学家的“直觉”变成算法的“自觉”

■本报见习记者 任芳言

化学家的研究直觉是怎么培养的?靠多年的实验积累。如今,研究者尝试培养机器学习算法的“直觉”,经过训练,算法可以比研究者学得更快。

5月18日,厦门大学研究人员在《物质》上发表文章,通过机器学习,他们找到了铝给氧簇金属有机框架(MOF)合成过程中的关键变量:调节剂浓度和配体溶解度。据此经验,他们实现了二维薄膜、凹八面体或空心八面体等一系列不同形态 MOF 的精准制备。

“算法把这些变量的重要性呈现给我们,这跟化学家的经验和直觉也是吻合的。”论文通讯作者之一、厦门大学化学化工学院教授汪骋告诉《中国科学报》。

## 从“没定律”到“有地图”

在合成化学领域,研究者常常调侃:晶体生长的第一定律就是没有定律。这侧面说明了提升材料制备的精确度有多难。

以 MOF 的制备为例,目前研究提出的生长理论只能提供模糊的方向,研究者在实验中往往要不断试错。MOF 的稳定性受金属

氧化态、还原电位、离子半径等因素的影响,研究者在制备过程中需要调节温度、酸碱度、反应物浓度等多个参数。

“当多个变量同时变化时,化学家的直觉不一定很准。”论文通讯作者之一、厦门大学数学学院副教授周达表示。

如果用机器学习方法指导材料设计,能在多大程度上提高材料制备效率?带着这一念头,汪骋和周达展开了合作。

研究团队首先用决策树算法分析了不同合成条件下的物相和形貌,批量制备 MOF,进而找出影响材料形貌的重要变量:水和甲酸浓度。他们再用随机森林算法确定形貌和试验条件的对应关系。

“我们发现水和甲酸这两个变量最关键后,就去集中调节它们,看会有怎样的结果。”汪骋说。在他看来,经过训练的机器学习算法能描绘出材料制备的地图,告诉研究者材料制备的方向,“对整个流程掌控有很大帮助”。

## 驯化算法,改布点方式

与传统实验中控制变量法设置的指标不

同,为了训练算法,研究者需要让变量分布得相对均匀,即用更发散的布点方式。获得材料合成过程中的数据后,研究者可以根据实际需求选择算法,做参数训练。最终,他们从看似纷繁复杂的数据图表中,获得晶体制备的宝贵经验,并绘制出相图。

“这有些像教学生”,周达表示,材料制备中获得的实验数据,一部分用于参数训练,就像给学生的阅读教材;另一部分则用于检测,就像考试题。

对汪骋而言,能制备出的纳米材料越薄越好。为了更快地对纳米薄片进行测量、总结制备规律,他与周达等人又用上了图像识别中的 Mask-RCNN 算法。

为了降低测量成本,研究团队选择用扫描电镜技术获得纳米薄片厚度信息,但由于薄片的状态不规则,就需要通过算法进行筛选。扫描了超过 1500 张电镜图像后,他们终于确定了制备 MOF 的最佳条件。并据此设计出复杂的分步合成序列,获得更多复杂的 MOF 及其结构。

“这些不同形貌的纳米材料用于烯烃加氢的催化反应,展现了非常不同的活

性。”汪骋表示。

## 拥抱“尤里卡时刻”

但目前来看,这一系列操作的成本还有压缩空间。由于需要批量制备薄膜,人力物力成本较高,且数据量很大,还要考虑电镜等使用成本。“我们现在正在尝试从自然语言,即现有的文献中提取信息,扩大数据来源,降低成本。”汪骋说。

“与传统的盲目试错相比,此方法大大缩短了获得理想晶相的时间。”武汉大学化学与分子科学学院教授邓鹤翔这样点评道。

邓鹤翔对《中国科学报》表示,晶体合成的魅力在于寻找合适的化学反应条件,而灵光乍现得到理想产物是研究者“最为欣喜的尤里卡时刻”。如果用传统方法,这种寻找的过程往往很漫长。

不止于合成化学,汪骋等人已经开始将算法运用到催化研究中。“我觉得在机器学习进来之后,这个领域可能有新的突破。”汪骋说。

相关论文信息:  
<https://doi.org/10.1016/j.matt.2020.04.021>

## 简讯

### 傅伯杰获 2020 年英国皇家地理学会荣誉会士

本报讯 5月18日,英国皇家地理学会公布了 2020 年度奖章与荣誉会士授予名单,中科院生态环境研究中心研究员傅伯杰被授予英国皇家地理学会荣誉会士。

英国皇家地理学会荣誉会士授予长期在地理学及相关领域工作、为地理学发展和社会发展作出卓越贡献的

科学家和专业知名人士。自 2003 年设立以来,全球共有 31 位科学家和专业知名人士获此殊荣,傅伯杰是唯一的中国学者。傅伯杰主要从事自然地理学和景观生态学研究,在土地利用结构与生态过程、景观生态学 and 生态系统服务、可持续发展等方面取得了系统性创新成果。(胡琨琦)

### 青岛举办科学技术奖初评答辩线上培训会

本报讯 近日,青岛市科技局举办科学技术奖初评答辩线上培训会,助力相关单位熟悉答辩流程,提高准备效率。据介绍,线上参加人员近 7000 人次,除了青岛市报奖人员外,山东省内其他地市乃至全国各省市相关人员也积极学习参与。

据了解,本次培训从科技奖答辩的难点堵点出发,邀请专家通过政策解读、实操操作和经验分享等方式,分别从裁判员、教练员、运动员 3 个角色,为各单位深入分析和讲解了评审流程、答辩 PPT 制作及注意事项。(廖洋 彭云杰)

### 广东佛山无人机自驾系统项目投产

本报讯 5月17日,广东省科学院的孵化企业——佛山中科云图智能科技有限公司自主研发的无人机自驾系统项目,在佛山市南海区丹灶镇正式投产。据悉,该公司由中国科学院院士周成虎担任法定代表人,是佛山首个院士担任法定代表人的企业研发生产类项目。

心、面向多行业深度应用,向智能化城市管理方向不断延伸发展。该项目落地丹灶镇,将助力推动当地智能安全产业的进一步智慧化。根据规划,项目投产后将实现年产无人机 1000 台、5G 无人机 3000 台、专业传感器 3000 套,为电力、水务、农林、测绘以及高精度地图等行业用户提供软硬件工业级无人机自动化解决方案。(朱汉斌)



复叶缘何千姿百态

此外, PINNA1 PALM1 双突变会产生出多级复叶。更深入的研究揭示, PINNA1 基因编码的蛋白一方面能在顶小叶原基中独立发挥作用,另一方面也能与 PALM1 蛋白在侧部小叶原基中协同合作,来实现对复叶发育过程中 SGL1 时序表达的精确控制,从而决定复叶中的小叶数目和排列方式。

“如果能够改变叶的形态来提高其光合效率,对生物产量的整体提高是非常明显的。”陈江华表示,未来将继续带领团队关注如何提升牧草的产量、品质、蛋白含量等。相关论文信息:  
<https://doi.org/10.1038/s41477-020-0642-2>

此外, PINNA1 PALM1 双突变会产生出多级复叶。更深入的研究揭示, PINNA1 基因编码的蛋白一方面能在顶小叶原基中独立发挥作用,另一方面也能与 PALM1 蛋白在侧部小叶原基中协同合作,来实现对复叶发育过程中 SGL1 时序表达的精确控制,从而决定复叶中的小叶数目和排列方式。

“如果能够改变叶的形态来提高其光合效率,对生物产量的整体提高是非常明显的。”陈江华表示,未来将继续带领团队关注如何提升牧草的产量、品质、蛋白含量等。

相关论文信息:  
<https://doi.org/10.1038/s41477-020-0642-2>

# 傅向东:让水稻少“吃”肥料多打粮

■本报记者 冯丽妃

说起中国科学院遗传与发育生物学研究所研究员傅向东,很多研究水稻遗传的人都会想到一个称呼——“GA MAN”。

这与傅向东的研究方向——赤霉素不无关系。这种可调控水稻养分吸收、影响水稻产量的激素的英文缩写正是“GA”。让水稻少“吃”肥料多打粮,傅向东沿着这条路已经走了 20 多年。团队的研究成果多次登上《自然》《科学》等期刊的封面,助推我国水稻研究走向国际前沿。他们的很多研究成果还被育种学家采用,从实验室走进了田间,丰实了一方粮囤。

“创新为民,惠泽五州”,在傅向东的办公室里,小麦遗传育种学家、中国科学院院士李振声的题字非常醒目。“如果能将个人兴趣跟国家需求相结合,实现自己的理想,又对别人有帮助,是件幸福的事。”傅向东说。

## 带着问题向前走

今年 2 月初,傅向东团队发现赤霉素信号传导新机制提高水稻氮肥利用效率,这一研究成果登上《科学》封面,在业内引起很大关注。

从克隆水稻氮高效基因 NGR5,到基因功能验证和后续分子机制解析,这项研究历经 10 多年。它让人们了解了水稻如何感知和响应土壤氮含量变化,进而调控水稻株型和产量。

早在 2001 年,师从英国皇家学会会员、牛津大学教授尼克·哈伯德时,傅向东就把目光聚焦于“绿色革命”的分子机制。上世纪 60 年代,半矮化作物育种引领了农业史上的“绿色革命”,让全世界水稻和小麦产量翻了一番。半个多世纪后,带着“绿色革命”烙印的半矮化水稻、小麦却给农学专家带来了新的困



扰。农民大量施肥,不仅没有获得想要的产量,而且还带来了土壤酸化、湖泊污染等环境问题,副作用日益突显。

“绿色革命”产量增加和氮肥利用效率降低之间有没有关联性呢?当时科学界尚无答案。带着这个问题,傅向东通过实验证明了半矮化作物品种中赤霉素信号途径的阻遏因子 DELLA 蛋白积累较高,使得农作物具有耐高肥、抗倒伏和高产特性,但同时伴随着氮肥利用效率下降。研究结果受到极大关注,哈伯德称其“不可思议”。

一个问题被解开了,等待着傅向东的是更多的问题。能不能在“绿色革命”品种高产的基础上,提高氮肥利用效率?在减少施肥条件下,如何提高每株水稻的穗粒数和分蘖数?傅向东突然意识到,如果把自己的科研兴趣和国家需求结合起来,再从中找到有意思、有挑战性的科学问题,或许是最佳的选择。

## 做科研很幸福

机会来了。2005 年,傅向东毅然回国,放弃了以前从事的拟南芥研究,转而投入并不熟悉的水稻领域。

傅向东从中国大面积种植的“超级稻”中挖掘和克隆影响水稻高产性状的关键基因,另一方面寻找适宜的突变基因。他的目标很明确:超越“绿色革命”,降低农业高肥耗,通过分子育种突破产量的“天花板”。

经过 10 多年的探索,傅向东团队的一些研究逐渐开花结果。在水稻增产方面,他们克隆了协同提高水稻产量和氮肥利用效率的直立德基因 DEPI1,找到了能够让水稻穗粒数和产量增加的新株型基因 NPT1 等关键基因。在减少化肥施用方面,傅向东团队找到了氮高效利用基因 GRF4,从分子水平上为破解“绿色革命”矮秆育种带来的氮肥利用效率下降的育种难题给出了明确的解决方案。

在此基础上,傅向东团队克隆了调控水稻分蘖和产量性状响应的土壤氮素水平变化的关键基因 NGR5。他们将优异等位基因 GRF4 和 NGR5 叠加,可协同提高作物产量、光合作用和氮肥利用效率,为突破“少投入、多产出、保护环境”育种瓶颈提供了具有重要应用价值的基因资源。傅向东团队还跟国内农业大学、农科院以及种业公司合作,把新发现的优异等位基因应用到育种实践中。

这些成绩让我国水稻研究令世界瞩目,傅向东先后被授予了“第十一届中国青年科技奖”“大北农科技奖”“全国优秀科技工作者”“中青年科技创新领军人才”“谈家桢生命科学创新奖”等奖项。

## 未来仍要倍加努力

如果把十多年来获得的全部优异等位基因叠加在一起,能让水稻产量提高多少呢?傅向东坦言,目前实验室里做研究的产量很高,可以达到每亩 800 公斤到 1000 公斤,但实际生产中仍处于平均亩产四五百公斤的瓶颈。

“产量是复杂性状,不仅仅是靠遗传因素决定的,还有很多环境因素的限制。”他举例说,全球升温会提高植物光合作用,促进植物生长发育。但植物像人一样“不光吃素还要吃肉”,它们还要从土壤里吸收更多的水分、矿物质元素等。与此相对,我国北方地区存在水资源短缺、化肥使用过量等问题,要解决这些问题,又面临一个个新的挑战。

“东环相扣,这就是遗传学研究的魅力。”傅向东说,在不同环境下怎么发挥模块化的分子调控网络的最大效应值,这是科学家或育种家应该更加关注的问题。

但做科研免不了失败和挫折。有学生申请到他实验室做研究,傅向东曾“吓唬”他们道:“做科研苦,做农业科研更苦;而且五六年来,不见得能发一篇论文。”他把“丑话说在前头”,是希望能够招到真正对科研感兴趣的人,这样的人遇到困难才会坚持下去。“发文章不是做科研追求的终极目标,认认真真去做一件事,做好了自然而然就会有文章。”他说。

“在水稻功能基因组学研究方面,中国已经走在国际前沿。”傅向东说,但除了水稻,我国还有很多别的作物如玉米、小麦等的研究都有待提升。所以,国际科学交流仍十分重要,只有在别人基础上以人之长补己之短,才能实现弯道超车。

## 发现·进展

### 中国科学院深圳先进技术研究院

# 研发出新型镁基双离子电池

本报讯(见习记者刁雯萱)近日,中国科学院深圳先进技术研究院唐永炳团队,研发出了一种基于不溶性有机负电极材料的镁基双离子电池。相关成果发表于《能源存储材料》。该项目有望为发展新型镁离子电池电极材料及器件提供新的思路。

“镁离子电池具有高容量、储量丰富、成本低等优势,未来在储能领域具有良好的应用前景。”团队成员张帆告诉《中国科学报》。然而,镁作为一种良好的储能材料,如何真正将其运用到电池中却是个难题。

一方面,传统的有机碳酸酯类电解液会与负电极发生钝化反应,产生一层致密的氧化物薄膜,阻碍镁离子通过,最终导致镁离子不能可逆沉积/溶解。另一方面,不同于锂离子可以轻松地在正负极材料之间快速运输,镁离子由于带电荷较多,进入脱出正极材料结构的速度慢,而且镁与正极材料的结合力度更强一些,脱出时有可能导致正极材料坍塌,使得镁离子电池可逆充放电性能较差。

在正极材料上“出不去”,在负极材料上“进不来”,究竟如何解决镁离子的“通行证”,让镁离子真正发挥功效,实现低成本并具有良好的充放电效果?研究团队决定,采用一种双离子反应来解决镁离子的问题。研究团队改变传统的研究思路,将正负极材料进行调整,研发出一种新型的镁基双离子电池。研究人员将含有镁盐的离子液体作为电解液,在正极端,使用膨胀石墨作为正极材料,而在负极端,他们决定采用一种不溶于电解液、具备良好储镁性能的有机小分子作为负极材料,这改变了电极材料多以无机材料出现的传统。

这种镁基双离子电池的工作机理如下:充电时,电解液中的阴离子在正极材料中与石墨发生插层反应,而在负极端则是将电解液中的镁离子储存在有机小分子材料中;放电时则相反,电极材料中的阴阳离子再次回到电解液中。通过结合双离子反应的工作机理,很好地解决了传统镁离子在正极材料中反应慢且不可逆的问题,同时也提升了镁离子电池的输出电压。

该研究结果表明,这种镁基双离子电池具有优异的倍率性能和循环性能,高倍率充放电容量保持率为 85%,在 5C 倍率下循环 500 次后的容量保持率为 95.7%。该成果拓宽了新型镁离子电池电极材料的选择范围,团队未来将继续结合双离子工作机制,研发基于不同廉价金属元素的新型电池,为发展新型高性能低成本储能器件提供新的思路。

相关论文信息:  
<http://doi.org/10.1016/j.ensm.2020.04.025>

### 上海交通大学

# 提出随机化共振超材料结构

本报讯(记者黄幸)上海交通大学机械与动力工程学院教授何清波研究组提出了随机化共振超材料结构,突破了单传感器溯源技术难题。该成果论文近日发表于《自然—通讯》。

在自然界,蜘蛛可以灵敏感知和定位落在蛛网上的昆虫的振动。像蜘蛛一样利用传感器对远处的振动激励进行感知和定位即为溯源溯源,在医疗健康监测、机器故障诊断、智能设备和物联网等领域具有重要的应用价值。传统的溯源溯源技术通常依赖于多个分布式传感器或传感器网络,测试系统复杂且功耗较高。

为了突破传统溯源溯源技术受传感器数量限制的瓶颈,何清波等人利用超材料结构原理,提出了振动传递特性设计和调控的思路。超材料是一种自然界不存在的人工复合材料,具有超常的动力学特性。研究人员提出了随机耦合共振子动力学理论,建立了一种融入等效质量特性的动力学分析方法,并以此指导设计了随机耦合局域共振超材料结构模型,该模型包含多个具有随机共振频率且无序耦合的局域共振子。

研究人员发现,该超材料结构模型局域共振子等效质量的随机分布与耦合产生了高度不相关的空间振动传递特性,这形成了振动传递特性编码设计的物理机制。研究人员进而利用振动传递特性编码特性构造了压缩感知算法的观测矩阵,仅利用一个振动传感器的测量信号,实现了对多源宽带振动激励的高精度辨识,并且证明了该方法具有鲁棒性。

该超材料结构形式具有灵活的单元可重构性,可以满足不同应用场合的需求。研究人员还创建了一种基于单传感器溯源溯源的适用于指令、通信、加密和触摸传感的新型人机交互方式。

相关论文信息:  
<https://doi.org/10.1038/s41467-020-15950-1>



随机化共振超材料结构破解单传感器溯源溯源技术难题。