

“小柯”秀

一个会写科学新闻的机器人

《美国化学会志》

对比学习揭示发表偏倚与化学反应性的关系

美国麻省理工学院的 Connor W. Coley 团队利用对比学习揭示了发表偏倚与化学反应性的关联机制。近日,相关成果发表于《美国化学会志》。

研究人员探讨了这种发表偏倚与化学反应性之间的关系,而不是简单分析产率分布,并提出一种新的神经网络训练策略,即底物范围对比学习。他们通过将已报告的底物作为阳性样本,将未报告的底物作为阴性样本,这种对比学习策略教会了模型根据已公布底物范围表的历史趋势,在数字嵌入空间内对分子进行分组。

基于 CAS Content CollectionTM 中的 20798 种芳基卤化物(涵盖 2010 年至 2015 年的出版物)进行训练,研究小组通过直观可视化和定量回归分析证明,学习到的嵌入与物理有机反应性描述具有相关性。此外,这些嵌入适用于各种反应建模任务,如产量预测和区域选择性预测,强调了将历史反应数据作为预训练任务的潜力。

该工作不仅提出了一种化学领域的机器学习训练策略,以一种新方式从文献数据中学习,还构建了一种独特方法,通过分析出版物中的底物选择趋势揭示化学反应性趋势。

相关论文信息:
<https://doi.org/10.1021/jacs.5c01120>

更多内容详见科学网小柯机器人频道:
<http://paper.sciencenet.cn/Alnews/>

超导量子计算原型机“祖冲之三号”问世

(上接第 1 版)

一是实现“量子计算优越性”,即相干操纵 50 个量子比特,量子计算机对特定问题的计算能力超越最快的超级计算机。二是实现专用量子模拟机,相干操纵数百至上千个量子比特,用于解决经典计算机无法胜任的若干重要科学问题,如量子化学、高温超导机理等。三是实现通用容错量子计算机,在量子纠错的辅助下相干操纵至少上百万个量子比特,用于解决经典密码破解、人工智能、材料设计等领域的计算难题。

量子计算优越性验证了量子计算系统能够超越传统超级计算机的可行性,是量子计算具备应用价值的前提条件。

朱晓波介绍,目前实现量子计算优越性的量子计算机主要分为两种体系,一种是光子体系,主要代表为“九章”;另一种是超导体系,主要代表为“祖冲之号”和“悬铃木”。两者主要差别在于构建量子比特的方式不同,光子体系主要用光子构建量子比特,超导体系则主要用包含约瑟夫森结的超导电路构建量子比特。两种体系各有优缺点。

实现量子计算优越性是一个国家量子计算研究实力的直接体现。在这方面,中美是目前国际第一方阵,呈现交替领先的态势。

2019 年,谷歌率先宣称实现量子计算优越性,但该成果很快被中国团队用更先进的经典算法推翻。此后,以最优经典算法为比较标准,国际上首个被严格证明的量子计算优越性由潘建伟团队于 2020 年在“九章”光子量子计算原型机上实现;而超导体系首个被严格证明的量子计算优越性也由该团队于 2021 年在“祖冲之二号”处理器上实现。2023 年,潘建伟团队研发的 255 个光子的“九章三号”量子优越性超越经典超算 1 亿亿倍。2024 年 10 月,谷歌发布 67 比特超导量子处理器“悬铃木”,其量子优越性超越经典超算 10 亿倍。

朱晓波介绍,与“悬铃木”相比,不管在量子比特数目还是性能上,“祖冲之三号”均有所超越,因此才能在随机线路采样任务的速度上超过“悬铃木”100 万倍,为目前超导体系“最强”量子计算优越性。

推动量子计算从实验室走向专业化应用

量子计算优越性是量子计算强大性能的综合体现,是近期应用探索 and 实现可拓展量子纠错的基础。

朱晓波介绍,在“祖冲之三号”取得“最强”量子计算优越性的基础上,研究团队计划进一步提高量子比特的数目及性能,同时继续开展量子纠错。

目前,研究团队正基于“祖冲之三号”开展码距为 7 的表面码纠错研究,已取得良好进展,并计划进一步将码距扩展到 9 和 11,为实现大规模量子比特的集成和操纵铺平道路。

研究团队远期规划则瞄准通用量子计算机的终极目标:计划 10 至 15 年建成包含千逻辑量子比特、具有纠错能力的量子计算系统。同时构建完整的量子计算生态体系,包括自主可控的量子操作系统,形成从芯片制备到应用开发的全链条技术能力。通过跨学科合作,推动量子计算在量子化学模拟、药物研发等更多领域的深度应用,最终形成具有国际竞争力的量子计算产业集群。

朱晓波表示:“当前量子计算研究要想广泛实际应用仍存在技术瓶颈,主要包括如何进一步提升量子比特的数量和相关性能、量子纠错技术如何进一步持续发展、如何解决软件算法生态不完善以及系统成本高昂等问题。未来需要重点突破这些关键技术瓶颈,推动量子计算从实验室走向专业化应用。”

相关论文信息:
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.134.090601>

2050 年,全球 1/6 儿童和青少年面临肥胖

本报讯 一项新研究显示,随着肥胖率急剧攀升,预计到 2050 年,全球每 6 个儿童和青少年中就有一人肥胖。不过,研究人员强调,鉴于肥胖率在未来 5 年内可能显著增长,现在采取紧急措施有望化解这一公共卫生危机。

这项由澳大利亚默多克儿童研究所牵头并发表于《柳叶刀》的研究发现,在未来 25 年内,全球儿童和青少年中将有 3.85 亿人超重,3.6 亿人肥胖。这一数字涉及 3.56 亿名 5 至 14 岁的儿童和 3.9 亿名 15 至 24 岁的青少年,即每 6 个儿童和青少年中就有一人面临肥胖问题。

1990 年至 2021 年,全球 5 至 24 岁人群的肥胖率增长了 244%,达到 1.74 亿人。这表明,目前遏制肥胖的方法对这一代年轻人是失败的。截至 2021 年,全球 4.93 亿名儿童和青少年超重或肥胖。

“如果不立即制订为期 5 年的行动计划,年

轻人的未来将是黯淡的。”默多克儿童研究所的 Jessica Kerr 说,“儿童和青少年仍然是肥胖流行病中的弱势群体。预防是关键,因为肥胖很少能够在青春后期得到解决。”

Kerr 表示:“这一巨大负担不仅会造成数十亿美元的经济损失,而且会导致与高身体质量指数(BMI)相关的并发症,包括糖尿病、癌症、心脏病、呼吸疾病、生育和心理健康问题,这将对现在和未来的儿童和青少年产生负面影响,甚至有可能在未来几十年影响到我们孙辈的身体健康和生活质量。”

“尽管这些发现意味着缺乏协调一致的全球行动来减少肥胖,但我们的研究结果也带来了希望——如果在 2030 年之前采取行动,就可以避免这种发展趋势。”Kerr 说。

这项于 3 月 4 日世界肥胖日发布的研究,使用了由美国华盛顿大学健康指标与评估研究

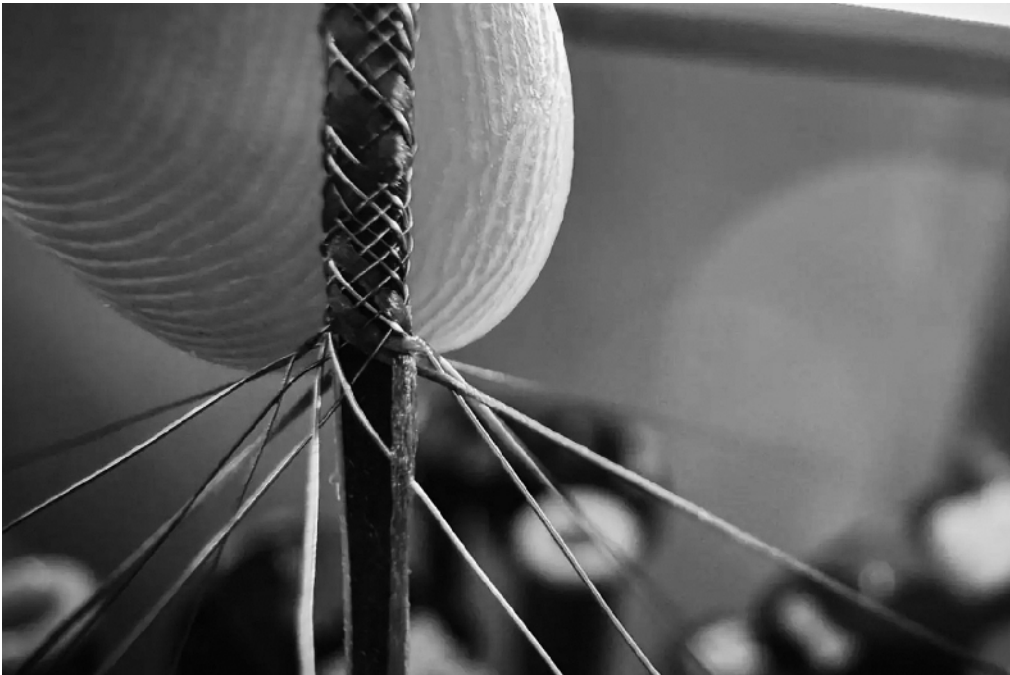
所领导的“2021 年全球疾病、伤害和风险因素负担研究”的数据,对 204 个国家和地区的最新超重与肥胖水平进行了估计及预测。

该研究指出,预计到 2050 年,阿拉伯联合酋长国、库克群岛、瑙鲁和汤加的肥胖率最高,而埃及、印度、美国等将成为肥胖儿童和青少年最多的国家。

在全球范围内,到 2050 年,5 至 14 岁肥胖男孩的人数将超过超重男孩的数量。

“如果不改变政策,北非、中东、拉丁美洲和加勒比地区的肥胖率将迅速增长,因为这些地区的人口数量迅速增加,而资源却有限。”Kerr 说。

研究人员表示,从历史上看,许多地区不得不一直专注于预防儿童营养不良和发育迟缓问题。如今,为防止这一新威胁引发公共卫生紧急情况,当务之急是每个国家都要开展针对儿童和青少年肥胖问题的全国性监测调查。



用金属和纺织纱线编织的线程计算机可用来制作服装。

图片来源:Hamilton Osoy

细管中,最后用棉花或凯芙拉合成纤维等织物将管子包裹起来。

为了进行测试,研究人员将 4 根线程缝进了一个人的裤腿和袖子中。他们发现,这些线程可以识别这个人的不同动作,如弓步、深蹲和手臂环绕等。

研究团队目前正在一场北极探险中测试用线程计算机制作的衣服,北极探险是加拿大军队年度军事演习“纳努克行动”的一部分。Fink 表示,这些衣服将记录身体不同部位的温度和数据,有朝一日可用于保护处于极端环境中的人员。

英国诺丁汉特伦特大学的 Theo Hughes-Riley 说,除了记录运动情况外,它还有助于检测穿戴者是否跌倒了。

Hughes-Riley 说,由于无须将传感器连接在一起,这种设计比其他电子织物简单得多。研究人员还证明,这种线程可以用清水清洗,但他们还没有使用过洗涤剂。因此,该线程计算机在被广泛应用之前,还需证明其在日常使用中的耐用性。

相关论文信息:
<https://doi.org/10.1038/s41586-024-08568-6>

■ 科学此刻 ■

把计算机织到衣服里

智能手表等可穿戴设备可以监测心率或体温,但通常只涉及一种身体信号,无法反映身体的整体运行状况。现在,美国麻省理工学院的 Yoel Fink 和同事开发出一种可以缝进衣服的计算

机,可记录大多数医疗传感器无法捕捉的全身数据。这种计算机由芯片制成,通过铜线和弹性纤维连接在一起。每个线程有 256 千字节的内存——相当于一个简单的计算器,同时配备了可以监测体温、心率和身体运动的传感器,并具有蓝牙功能,以便各个线程之间进行通信。2 月 26 日,相关研究成果发表于《自然》。

“这意味着它们可以共同收集身体特定位置的数据,理论上,人工智能可以利用这些数据更准确地监测人体的健康状况。”Fink 说,“我们正越来越接近这样一个目标,即为织物编写应用程序监测健康状况,做各种手机无法做到的事情。”

为了制作单个线程,Fink 和同事将芯片折叠成三维结构,并将其连接在铜线上。随后,他们用塑料保护套将铜线包裹起来,再装进一根

新型传感器可 5 分钟检测禽流感

本报讯 在美国持续蔓延的高致病性 H5N1 禽流感,对奶牛和家禽养殖场构成了严重威胁,农民和公共卫生专家迫切需要实时监测感染情况的新方法。近日,美国华盛顿大学圣路易斯分校教授 Rajan Chakrabarty 带领团队,改进了电化学电容生物传感器的检测速度和灵敏度,成功研发出能监测 H5N1 气溶胶颗粒的禽流感传感器。相关研究成果发表于《Acs 传感器》。

“这是首款能够检测空气中病毒和细菌颗粒的生物传感器。”Chakrabarty 说,传统检测方法使用耗时较长的聚合酶链式反应(PCR)DNA 检测技术,需要至少 10 小时,根本无法有效遏制疫情传播。新型生物传感器则可以在 5 分钟内完成检测,同时保留微生物样本以供进一步分析,并能显示农场的病原体浓度范围,为立即采取行动提供了可能。

当研究团队启动该项目时,H5N1 还仅限

于接触传播阶段。“随着研究的推进,病毒也在发生变异。此次流行的毒株与以往的存在显著差异。”Chakrabarty 说。过去一年,禽流感病毒已发生危险变异——可通过空气颗粒传播给哺乳动物,包括人类。该病毒已被证实可造成猫科动物死亡,并至少导致一例人类死亡病例。美国农业部动植物卫生检验局(APHIS)最新数据显示,美国 4 个州至少新增 35 例奶牛感染病例,其中大部分集中在加利福尼亚州。

当前防控措施包括生物安全隔离、场地消毒和设备灭菌,以及限制动物接触等防护控制,必要时将进行大规模扑杀。美国农业部近期有条件批准了禽流感疫苗,有望为禽类养殖场提供更多保护。

这款生物传感器是一台台式打印机大小的集成式病原体采样检测装置,可部署在禽舍通风口。其核心技术源自采集新冠病毒气溶胶

的“湿式旋风生物气溶胶采样器”——含有病原体的空气高速进入采样器后,与壁面液体形成表面涡旋,从而捕获病毒气溶胶。该装置中有一个自动泵送系统,每 5 分钟便将样本液体输送至生物传感器进行检测。

生物传感器的一大优势是非破坏性,样本检测后仍可保存用于传统 PCR 分析。此外,整套系统可全自动运行,无须生化专业知识即可操作,且采用经济易得的材料制造,支持大规模生产。

更值得关注的是,该生物传感器具备检测多种病原体的扩展潜力。Chakrabarty 透露:“虽然当前版本针对 H5N1 研发,但经过调整可检测其他流感病毒株(如 H1N1)、新冠病毒以及大肠杆菌、假单胞菌等,相关验证数据已体现在论文中。”

相关论文信息:
<https://doi.org/10.1021/acssensors.4c03087>

日本高考纳入信息学科能否收到预期效果

■新华社记者 钱铮

日本大学入学统一考试从 2025 年起增加信息学科,目的是培养能适应未来“超智能社会”的人才。此间专家和媒体指出,信息学科地位虽然提高,但仍面临专业教师不多、地区间差异等问题,此外,如何防止信息学科进高考后变成应试教育,也是决策者和教育一线工作者需要思考的问题。

日本 2025 年 4 月入学的大学入学统一考试已于 1 月结束。今年考试新增加的“信息 I”科目满分 100 分,出题主要涵盖 4 个方面的内容,即信息社会问题的解决、信息通信网络和数据的应用、计算机和编程、交流和信息设计。

日本国立大学的普通入学方式要求报考者参加大学入学统一考试作为初试,增加信息学科后,7 个必考学科包括国语、地理历史、公民、数学、理科、外语和信息。东京大学、京都大学等约 80%的国立大学要求报考学生必须参加信息学科的统一考试,而私立大学则将信息学科作为选考科目。今年共有近 30.2 万名学生参加了信息学科考试。

信息学科进高考是日本 2022 财年将信息课列为高中阶段必修课政策的延续。2022 财年

的新学习指导大纲将信息课分成“信息 I”和“信息 II”两种,其中,“信息 I”为必修课。从课程内容来看,此前大部分学生未学习的信息通信网络和数据的应用、计算机和编程这两大块内容,成为日本所有高中生的必修内容。

从 2020 财年起,日本所有小学就必须实施编程教育。至此,日本从小学至大学信息教育链条的各环节就全部衔接起来了。信息学科进高考更是对高中阶段的信息教育质量提出了高要求。

随着人工智能(AI)和物联网等的发展,社会生活正发生巨大变革,日本流行的观点是社会将进入“超智能社会”。为了顺应这种变化,学校有必要培养学生辨别信息、运用信息技术解决问题的能力。此前由人类承担的许多工作在“超智能社会”可能会被 AI 和机器人取代,学生必须具备比以往更高的创造力和表现力,有能力从事只有人类才能胜任的工作,才能更好地在未来社会生存。

从社会需求来看,根据日本经济产业省的调查,到 2030 年,日本信息技术人才将出现约 45 万人的缺口,AI 方面的人才缺口将超过 12.4 万人。这就要求尽可能多地培养能熟练使用信息通

信技术、AI 和大数据并能创造新价值的人才。

不过也有专家观点认为,信息学科现在进高考有点仓促,因为整体学科建设的基础还没打好,特别是师资和教学环境方面存在的问题亟待解决。

日本文部科学省的一项调查显示,截至 2022 年 5 月,日本公立高中 4700 多名信息课教师中,近 800 人未取得正规的信息学科教师资格,并且师资力量还存在地区间的不平衡。即便在正规信息学科教师占大多数的地区,专业学习过编程和数据科学的教师也很少。

在信息教育环境的建立和完善方面,日本 2020 财年已基本完成中小學生人手一台平板电脑的配备,但一些地方还不具备充分利用这些设备所需的网络环境。在一些信息技术人才不足的地方,设备故障得不到及时修理,影响了课堂使用。在这种背景下,让信息学科进入高考如此重要的考试,不少人认为对有些地方的学生不公平。

另外,目前日本高中的课程设置将信息课放在高一,且高二、高三并未安排复习巩固的教学时间,而信息技术日新月异,如果不建立贯穿

Kerr 指出,年龄在 15 至 24 岁、处于生育年龄的女性是需要干预的重点人群。“如果要避免肥胖、慢性疾病的代际传播,并消除由此带来的可怕的经济和社会成本,那么肥胖的青春期女孩是关注的重点。”

“虽然个人和家庭可以努力平衡他们的身体活动、饮食与睡眠,但我们环境中的一切都在抵消这些努力。”默多克儿童研究所的 Susan Sawyer 表示,政府需要采取措施减少肥胖驱动因素。

Sawyer 建议,各国政府应加紧采取监管干预措施,包括对含糖饮料征税、禁止针对儿童和青少年的垃圾食品广告,并为中小学的健康膳食提供资金。此外还要考虑更广泛的政策,比如全面改革城市规划、鼓励积极的生活方式等。(王方)

相关论文信息:
[https://doi.org/10.1016/S0140-6736\(25\)00397-6](https://doi.org/10.1016/S0140-6736(25)00397-6)

最早的水可能形成于大爆炸后 1 亿至 2 亿年间

本报讯 水对于生命至关重要。一项研究指出,水可能最早形成于宇宙大爆炸后的 1 亿至 2 亿年间,而且可能是第一代星系的关键成分。相关研究近日发表于《自然-天文学》。

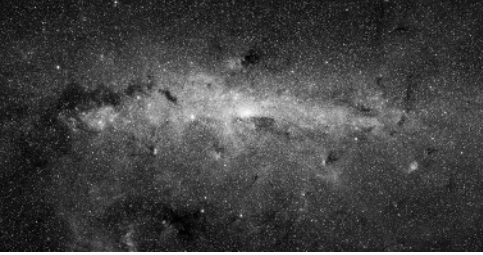
水的成分——氢和氧是以不同方式形成的。较轻的化学元素(如氢、氦和锂)形成于大爆炸期间,而更重的元素(如氧)则是恒星内部核反应或超新星爆发的产物。因此,目前仍不清楚水在宇宙中形成的时间。

英国朴茨茅斯大学的 Daniel Whalen 和同事利用两个超新星的计算机模型分析了这些爆炸的产物。其中一个模型模拟了 13 倍太阳质量的恒星,另一个则模拟了 200 倍太阳质量的恒星。他们发现,由于达到了极高的温度和密度,第一个和第二个模拟中分别产生了 0.051 倍和 55 倍太阳质量的氧。

研究人员发现,随着这种气体冷却并与超新星在周围留下的氢混合,水便在遗留的致密物质团块中形成。这些团块可能位于第二代恒星和行星的形成位置。在第一个模拟中,作者发现在超新星事件后的 3000 万至 9000 万年,水的质量达到了 1 个太阳质量的 1 亿分之一到 100 万分之一。在第二个模拟中,水的质量在 300 万年后达到了约 0.001 个太阳质量。

研究者表示,如果水在第一代星系具备潜在毁灭性的形成过程中得以保存,那么它可能在数十亿年前就参与了行星的形成。(冯维维)

相关论文信息:
<https://doi.org/10.1038/s41550-025-02479-w>



图片来源:Pixabay

欧盟拟放宽车企碳排放规则

据新华社电 欧盟委员会主席冯德莱恩 3 月 3 日表示,将于本月提交针对二氧化碳排放标准法规的修订方案,给予欧洲车企更灵活的排放合规方式。

冯德莱恩当天在一场新闻发布会上表示,该方案将允许欧洲汽车制造商在三年内灵活履行排放合规要求,取消现行年度单独审核二氧化碳排放达标情况。她说:“排放总体目标保持不变,企业仍需达标,但这一决定将为行业提供更多缓冲空间。”

按现行规定,未能通过年度排放审核的车企将面临巨额罚款,因此行业呼吁欧盟提供更灵活的合规方式。该方案尚需得到欧洲议会和欧盟理事会的批准。(丁英华 康逸)

整个高中阶段的课程,信息学科可能变成一门为高考而学习的学科。编写中学编程教材的丸本德之建议,高中阶段信息课设置要遵循高一学习、高二实践、高三再确认和巩固的模式。如果这一模式得以实现,那么学生具备的能力不仅足以通过大学入学统一考试,也能在大学期间乃至进入社会后发挥作用。

也有专家指出,信息学科进高考的效果需要在更好的大环境中才能显现。伊藤忠综合研究所主任研究员赵玮琳说,日本社会盛行文科,对理工科的重视不够。在日本,学文科很好就业,许多学生避重就轻,不愿费力去学理工科。日本科学技术国际交流中心理事长冲村宪树此前接受记者采访时说,日本私立大学数量占大学总数的七八成,私立大学对于不赚钱的学科不愿投入很多。理工科需要大量实验设施、设备的投资,学生数量又不多,私立大学不愿投入。约三分之二的日本大学生攻读文科专业,导致整个日本社会缺乏理科思维。不少专家认为,日本需要更加重视科学、技术、工程和数学教育,营造更好的大环境,才能让信息学科进高考收到预期效果。