

数量超越 AlphaFold

新 AI 工具可预测 11 亿个蛋白质结构

本报讯 随着一款人工智能(AI)工具的问世,蛋白质的世界变得更大。目前,这个新工具已经生成了 11 亿个预测蛋白质结构和 68 亿个蛋白质序列的图谱。

5月27日,美国生物医学机构 Biohub 的研究人员发布了这一名为“ESM 图谱”的数据库。Biohub 由美国社交平台“脸书”创始人马克·扎克伯格及妻子普利希拉·陈创立。

ESM 图谱预测的蛋白质结构比谷歌旗下深度思维公司的 AlphaFold 数据库多出 8 亿多条,比之前的 ESM 图谱多约 3 亿条。

“这一图谱全面展现了蛋白质生物学全貌,尤其是其中最不为人知的部分。”领导该项目的 Biohub 科学主管 Alex Rives 表示,“我们认为,它将成为生物学新发现的重要基础。”

这些预测结果是利用 AI 模型 ESMFold2 得出的。Biohub 称,ESMFold2 是完全开源的,其性能超越了 AlphaFold3 的最新版本和其他蛋白质结构预测 AI 系统。

ESMFold2 基于 Rives 团队 2024 年发布的

蛋白质语言模型。该模型由来自“生命之树”的数十亿个蛋白质数据训练而成,包含土壤、海洋和其他环境的宏基因组序列,而这些序列并未收录于 AlphaFold 的数据库中。

研究人员表示,在确定相互作用蛋白复合物的正确结构方面,包括抗体分子与其抗原分子靶点的结合上,ESMFold2 的表现优于包括 AlphaFold3 在内的现有方法。

在一篇公布于预印本服务器的论文中,研究人员描述了他们如何利用 ESMFold2 设计能强力结合癌症和免疫疾病相关蛋白的新型抗体及其他蛋白质。实验室测试显示,很大比例的设计结果都与预期一致。

Rives 表示,希望这一免费开源的 ESM 图谱能帮助科学家在蛋白质世界的已知与未知部分建立联系。

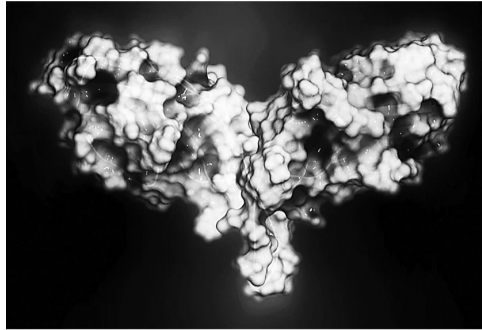
在瑞典隆德大学的 Gemma Atkinson 看来,新发布的 ESM 图谱是“生物学领域的一个非凡资源”。“看到大规模蛋白质语言模型如何捕捉蛋白质生物学的基本规律,令人感到兴奋。”

英国伦敦大学学院的 Christine Orengo 认为,这些预测虽然首先需要经过评估,但有助于发现新的蛋白质折叠方式和功能,对蛋白质设计和生物学基础研究具有重要意义。

韩国首尔大学的 Martin Steinegger 最关心的是 ESMFold2 在预测与已知结构不同的蛋白质方面表现如何。他的团队发现,ESMFold1 在预测非常规蛋白质结构方面表现并不出色,尤其是那些存在于宏基因组数据中的结构。

美国麻省理工学院的 Sergey Ovchinnikov 则认为,ESM 图谱是对广泛使用的、包含超过 2 亿个蛋白质结构的 AlphaFold 数据库的补充,而非替代。

Ovchinnikov 补充道,ESMFold2 对蛋白质相互作用的预测令人印象深刻,但并不出乎意外。今年早些时候,深度思维公司旗下机构发布了一款专有模型,在预测此类结构方面取得了显著进展。他表示,虽未直接与 ESMFold2 进行对比,但其他开源模型在预测蛋白质相互作用方面也取得了令人瞩目的成果。



AI 工具设计出了能够与细胞毒性 T 淋巴细胞相关蛋白 4 (CTLA-4) 结合的蛋白质。图片来源: Molekuul

不过,Ovchinnikov 认为,ESMFold2 完全开源和不受任何商业使用限制的性质,意味着它即将得到广泛的应用。“我预计很多人会乐于尝试使用 ESMFold2。” (文乐乐)

欧洲多国为何遭遇气候“黑天鹅”

■新华社记者 郭爽 荀伟等

在世界气象组织和各国气象机构通用的“气象季节”定义中,北半球的 5 月被划定为春季。然而,今年 5 月下旬,多个欧洲国家提前遭遇“盛夏”式热浪。高温打破多地气象纪录,给民众生活、健康及社会运转带来严峻挑战。

尽管近年来欧洲频繁遭遇热浪,但今年春季多地刷新高温纪录,让不少气候学家感到“难以置信”。专家指出,这是全球气候变暖趋势加剧的明显信号,类似的气候“黑天鹅”事件正变得越发频繁与强烈。

春天里的“盛夏”

英国近期的升温曲线引人关注。英国气象局数据显示,5月26日,首都伦敦的邱园录得 35.1 摄氏度高温,连续两天打破英国 5 月及春季的高温纪录。这也是英国有气象记录以来一年里最早达到 35 摄氏度的日期,此前的纪录为 1976 年的 6 月 26 日。

在隔海相望的法国,西部多个省份已发布高温橙色预警。法国气象局数据显示,5月25日是法国有关记录以来 5 月最热的一天。

南欧的形势也不容乐观。西班牙国家气象局 26 日警告,西班牙本周会经历一轮“典型盛夏式高温”,多地气温将较常年同期偏高 5 至 10 摄氏度,南部内陆部分地区最高气温可能逼近 40 摄氏度。意大利卫生部 26 日发布的气象公报显示,该国多地已亮起红色或橙色高温警报。

提前高温尤其危险

提前到来的热浪猛烈冲击着欧洲国家的公共卫生体系、基础设施以及社会的正常运转。

高温之下,英国已有多名未成年人在游泳避暑时溺水身亡。法国政府发言人 26 日证实,高温天气近日已造成 7 人死亡。在西班牙巴斯克地区,上周末有约 30 人因高温出现眩晕、脱水和中暑相关症状。

高温导致紧急护理需求增加,英国一些地区的救护车服务已出现中断。法国政府表示,如果气温过高,地方政府和教育机构可以决定停课,未来几天可能会有一些体育赛事被取消。葡萄牙气象专家警告,持续的高温将显著增加葡萄牙全国范围内的森林火灾风险。

气候专家指出,由于人体需要逐渐适应气温变化,提前到来的热浪尤其危险。英国帝国理工学院气候科学教授弗里德里克·奥托表示,如今气候已发生改变,建筑和基础设施却没有得到及时调整。意大利大气动力学专家马蒂亚·古索尼指出,热浪会对全球经济和粮食安全造成严重冲击。

“黑天鹅”可能会常来

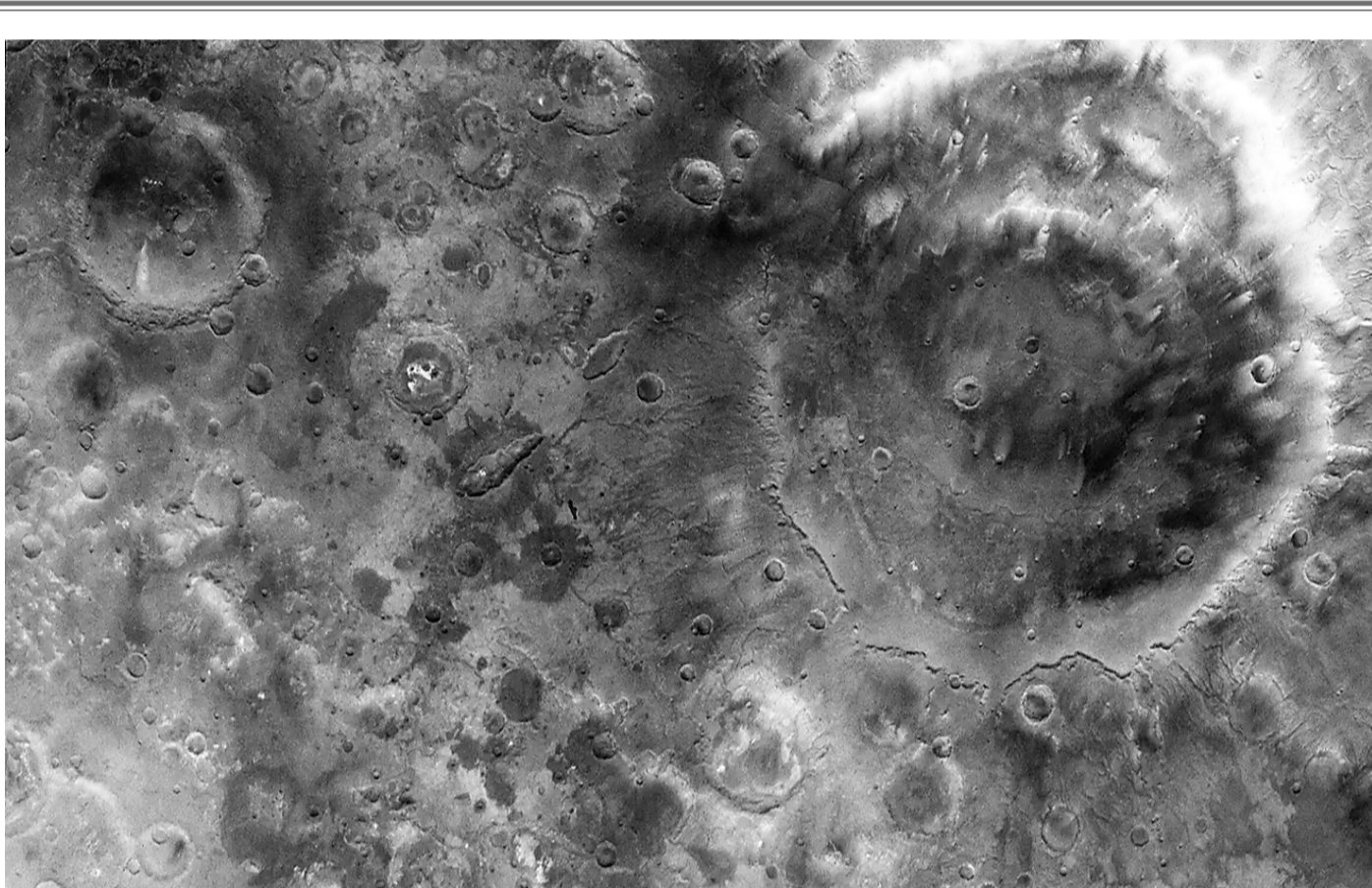
对于本次热浪的成因,葡萄牙海洋和大气研究所解释,受到来自非洲的热气流与持续笼罩西欧上空的高压系统——“热穹顶”共同影响,热空气被“扣”在了伊比利亚半岛,导致气温不断攀升。

古索尼表示,太平洋地区正出现“超级厄尔尼诺”,以间接而复杂的方式影响欧洲气候,包括促使非洲副热带反气旋比往常更大幅度地向北推进,导致欧洲出现高温。

专家指出,这些诱因的背后,是全球气候变暖的持续影响。古索尼认为,在全球变暖持续的背景下,来自非洲的热浪在地中海地区不仅变得更加强烈,而且持续时间更长,导致过量热量被储存在地中海中,成为后续季节的异常能量来源,进而增加洪水风险,助推更猛烈的风暴。

法国气候学家克里斯托夫·卡苏认为,欧洲近期的高温超出常规统计范围,在身体感受和认知层面都令人震惊,是一次气候“黑天鹅”事件;但从长期来看,气候变化会导致热浪更加频繁、强烈且来得更早。

有关气候研究显示,欧洲是全球升温最快的大陆。英国气候变化委员会日前发布的一份报告指出,传统认知中的英国气候“已不复存在”。爱尔兰梅姆斯大学伊卡洛斯气候研究中心主任彼得·索恩说,虽然人们都知道气候变化会使热浪更加频繁与强烈,但欧洲今年提前出现的热浪仍然“疯狂到令人难以置信”。



Psyche 探测器拍摄的火星表面,右上为双环结构的惠更斯环形山。

图片来源: NASA

美国国家航空航天局 (NASA) 的 Psyche 探测器近日在一次精确的飞越中成功掠过火星,此举有助于将它弹射到太空深处,并朝着最终目标——富含金属的奇异小行星 Psyche 进发。在这次相遇中,Psyche 探测器拍摄了令人惊叹的火星图像,为科学家研究这颗行星的地质构造提供了新的线索。

Psyche 探测器从距离火星表面 4609 公里的高度近距离掠过。在飞掠过程中,探测器拍摄了一系列图像,其中包括具有双环结构的惠更斯陨坑的惊人景象,后者被遍布陨坑的火星南部高地包围。

这张照片是用探测器上安装的多光谱成像仪拍摄的,凸显了这颗红色星球上崎岖的古老地形。此外,这次火星飞掠远不只

■ 科学此刻 ■

火星过客
拍下惊人画面

是一次拍照的机会。NASA 利用火星引力来提高探测器的速度,并在不消耗机载燃料的情况下调整其轨道。这种技术被称为

引力辅助,它帮助 Psyche 探测器踏上了通往最终目的地的正确道路。

利用火星引力,任务规划人员得以为探测器提供了一个很大的推动力,同时为任务后续阶段节省了宝贵的推进剂。

NASA 预计探测器将于 2029 年 8 月飞抵小行星 Psyche。一旦到达,它将进入轨道并开始绘制小行星表面的地图,同时收集科学数据。

研究人员对这颗小行星特别感兴趣,因为它可能具有一颗古老行星体暴露出的金属内核。行星体是太阳系早期形成行星的基石。如果这一理论是正确的,那么这颗小行星将为科学家提供一个难得的机会,研究通常隐藏在像地球这样的岩石行星深处的物质。(赵熙熙)

户外灯光延迟蚊子冬眠

本报讯 每年秋天,美国西尼罗病毒的主要传播媒介库蚊都会随着逐渐缩短的日照进入冬眠状态。然而,一项新研究发现,哪怕是后院的灯光也足以让这些蚊子推迟入睡,从而获得更多叮咬人的机会。

近日发表在《昆虫生理学杂志》的这项研究指出,夜间的人造光会严重扰乱蚊子进入休眠状态的能力,随着城市越来越亮,疾病的传播季也可能随之延长。“这项研究很有说服力。”美国罗格斯大学的 Dina Fonseca 表示。

秋天来临时,蚊子的幼虫才会孵化为成虫,它们会积极储存能量,并准备在地下室和洞穴等凉爽、黑暗的地方度过冬天。科学家早就知道,缩短的日照时间是蚊子进入休眠状态,即所谓“滞育”的主要信号。

早期实验室研究表明,低强度的人造光可能会干扰蚊子,推迟滞育。那么,在城市更复杂的环境中,是否也会出现同样的情况呢?

为找到答案,研究人员在美国俄亥俄州哥伦布市的居民院子里放置了饲养子的小型容器,其中一些直接放在现有的户外灯下,另一些则藏在同一处院落落的自然黑暗角落。待子发育为成虫后,研究人员收集了这些容器,以测试其中的蚊子是否

已进入滞育状态,或者仍处于可吸血和繁殖的活跃期。

研究显示,9 月份,在灯光下饲养的蚊子进入滞育状态的比例,大约为黑暗环境中的蚊子的 1/4。到了 10 月,对比变得更加明显:黑暗环境中的每只蚊子都进入滞育状态,而暴露在灯光下的蚊子仍有 59% 保持活跃。

论文主要作者、美国缅因大学的 Lydia Fyie 说:“光污染对越冬休眠的抑制效果比温度强得多。”即使只有 0.87 勒克斯(大致相当于星光下的夜晚亮度)的灯光,也足以引发蚊子的活动。

如果蚊子活跃的时间变长,意味着它们将有更多机会感染和传播疾病。这也意味着在冬季来临前可能会繁殖出更多的蚊子,从而导致有更多蚊子出现在次年春天,并在整个夏季形成更大的种群。

但 Fonseca 指出该研究存在的一个关键局限,即没有使用野外捕获的蚊子,而是用实验室培养的库蚊种群展开研究,后者在人工条件下繁殖多代,可能会有不同的反应。不过她承认,野生库蚊在人工环境中很不配合,这使得在实验室中对其进行任何研究都极为困难。

研究人员表示,下一步将在高光照和低



户外灯光可能推迟库蚊冬眠的时间。

图片来源: HERBERT SCHWIND

光照环境中对野生蚊子种群进行长期季节性监测,追踪其滞育状态开始和结束的多年变化。

“越来越多证据表明,夜间光照对蚊子的生物学特性和行为有着显著影响。”美国圣路易斯华盛顿大学的 Katie Westby 说,“究竟有多少蚊子会延长活跃期,以及这对它们越冬意味着什么,目前仍是一个有待解答的问题。” (李木子)

相关论文信息: <https://doi.org/10.1111/1365-2664.70407>

“小柯”秀

一个会写科学新闻的机器人

《科学》

二维和三维张量网络的无量子系统动力学

美国波士顿大学的 Dries Sels 团队研究了二维和三维张量网络的无量子系统动力学。相关成果近日发表于《科学》。

近期,D-Wave 公司的 Advantage2 系统在一系列晶格结构上实现了伊辛自旋玻璃的大规模量子退火动力学实验。经过与现有数值方法的广泛对比,这些实验被认为超越了经典计算的能力范围。

研究人员采用针对特定晶格结构的张量网络方法,对这些自旋玻璃模型进行了模拟。他们利用置信传播算法跟进时间演化过程中产生的纠缠,随后使用更先进的置信传播变体提取期望值。结果表明,仅需适度的计算资源即可达到当前最佳的精度水平。此外,该方法在二维和三维空间均具有良好的可扩展性,研究人员借此在涉及数百个量子比特的系统中验证了普适的基布尔-祖雷克物理行为。

相关论文信息:

<https://doi.org/10.1126/science.adx2728>

研究揭示中欧巨石文化社会的远距离遗传关系

德国基尔大学的 Ben Krause-Kyora 团队揭示了中欧巨石文化社会的远距离遗传关系。相关研究成果近日发表于《科学》。

欧洲新石器时代晚期的巨石通常被视为共同祖先的象征。研究人员分析了埋葬在与西部漏斗陶文化和瓦特贝格文化群体相关的 6 座巨石墓群中的 203 个个体的全基因组数据。尽管在考古学上被认为是不同的群体,但研究结果表明,来自这两个群体的个体在基因上是高度同质的。

此外,研究人员发现了跨越 225 公里的一级和二级亲属关系,揭示了意想不到的远距离联系以及持续的跨墓地和跨群体流动性。这 6 座巨石墓群作为公共墓地,并不是专门为近亲设计的,表明社会亲属关系在其中发挥了重要作用。与其他欧洲巨石有遗传联系的有限证据表明,纪念性是通过文化传播的,而不是通过生物网络传播的。

相关论文信息:

<https://doi.org/10.1126/science.aeb2926>

《自然》

森林碳协议低估气候驱动的碳损失风险

美国犹他大学的 William R. L. Anderegg 团队发现森林碳协议低估了气候驱动的碳损失风险。相关成果近日发表于《自然》。

维持和增强森林碳汇已被广泛推崇为基于自然的气候解决方案。然而,在估算森林对气候减缓的潜在作用时,可能导致森林碳储量损失的干扰因素很少被考虑。这使得科学家难以合理设定“缓冲池”的规模——该机制旨在补偿碳信用项目中非预期的碳损失。

研究团队利用森林清查、卫星数据、干扰模拟和机器学习等方法,绘制了美国本土因自然干扰导致的碳逆转(碳损失)风险分布图。结果表明,气候变化增加了美国本土森林百年尺度上因自然干扰导致碳损失的风险,尤其是在加利福尼亚州和西部山区。当前美国本土最大的森林气候减缓项目采用的“缓冲池”规模可能过小,平均仅为所需规模的 1/6;如果考虑未来气候情景、干扰严重程度和其他碳库的不确定性,这一偏差可能在 2.2 倍至 8.0 倍之间。

研究提供了自然干扰导致森林碳损失的长期风险空间分布图,表明当前构建碳抵消“缓冲池”的方法学需要进行修订,才能在气候变化背景下取得成功。

相关论文信息:

<https://doi.org/10.1038/s41586-026-10571-y>

发散型城市风暴对对流、锋面和热带系统的响应

美国得克萨斯大学奥斯汀分校的雅鑫斯团队揭示了发散型城市风暴对对流、锋面和热带系统的响应。相关成果近日发表于《自然》。

研究人员基于事件的分析,研究了城市响应如何随风暴类型而变化。利用 1995 年至 2017 年的三维雷达反射率数据,他们在得克萨斯州的 4 个城市(达拉斯、奥斯汀、圣安东尼奥和休斯敦)识别了超过 4 万场城市风暴。研究表明,将风暴分为 5 种类型,可以揭示与风暴尺度和动力学相关的不同城市响应。

由大气不稳定性驱动的局地尺度单体风暴和孤立对流风暴,其发生频率增加了 7% 至 31%,尤其是在夜间。天气尺度锋面风暴的发生频率未见变化,但强度响应截然相反。冷锋经过城市时强度减弱了 16% 至 28%,很可能是由热力粗糙度效应所致;而暖锋的反射率则有所增强。热带系统在频率或强度上没有一致性变化,但在城市区域,高反射率网格单元呈现出向更低海拔偏移的趋势。

这项工作为理解其他地区的城市-风暴相互作用提供了一个可迁移的框架。这些发现超越了传统“城市干/湿岛”模型,深化了对城市化如何调节极端降水的理解,并为气候模拟及快速扩张城市的韧性规划提供了参考。

相关论文信息:

<https://doi.org/10.1038/s41586-026-10479-7>

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