

人工智能 + 化学：机遇与挑战并存

■本报见习记者 蒲雅杰

“人工智能的快速发展深刻影响并重塑了科研范式，尤其是在化学领域展现出广阔的前景和巨大的潜力。”在近日举行的香山科学会议第768次学术讨论会上，会议执行主席、中国科学院院士白春礼强调。

在人工智能发展为化学研究带来前所未有的机遇和挑战的当下，与会专家围绕“人工智能化学：新范式下的机遇与挑战”这一主题，对人工智能在与化学学科的交叉和应用中亟待解决的重大问题展开了讨论。

人工智能带来化学学科新发展

在前沿进展方面，白春礼指出：“人工智能对于加速化学反应预测与新化学物质发现、实现化学实验自动化与智能化、促进化学与其他学科交叉融合、显著提升数据和文献的分析效率，都发挥了显著的作用。”

针对人工智能与机器自动化的有机融合，会议执行主席、中国科学技术大学教授罗毅展示了首个具有科学智慧的机器学习化学家系统“小来”。该系统可以完成文献读取、合成、表征、性能测试、机器学习模型建立和优化等全流程任务。

罗毅介绍：“‘小来’利用火星陨石自动优化制高镍合金产氧催化剂为例，火星陨石的成分可以组合成超过376万种配方，靠科学家手动验证需要花2000多年才能完成，而‘小来’仅用6周就找到了最佳



机器化学家系统“小来”。
中国科学技术大学供图

的催化剂配方。”

中国科学院院士、中国科学技术大学副校长杨金龙则专注于求解多电子薛定谔方程这一量子化学领域的核心问题。据介绍，其团队发展的基于生成式人工智能的“乾坤网络”可实现多电子薛定谔方程的直接求解，使得较复杂材料体系的计算从“不可能”逐步走向“可能”和“精准”。

人工智能方法在化学动力学理论研究方面也展现了巨大潜力。中国科学院院士、中国科学院大连化学物理研究所研究员张东辉指出，化学理论中的分子体系势能面

构造存在“指数墙”困难，即计算量会随分子体系中原子个数增长呈指数级增长，而神经网络能高效表达复杂的高维函数，可以有效解决这个难题。

张东辉介绍说：“目前在不存在费米共振的情况下，我们已经能够精确求解包含11个原子的丙烷分子的振动能量，但在高能量激发态的初始波函数构造上仍面临挑战，未来还需进一步突破。”

新范式也是新挑战

人工智能的快速发展正推动科学研究从经验驱动向数据驱动、自动化和智能化转型。这种新的科研范式核心在于利用人工智能技术提升科研效率、加速发现和发现，并解决传统方法难以应对的复杂问题。

中国科学院院士、北京大学国际机器学习研究中心主任鄂维南认为：“新的科研范式可以带来新的视角。比如在以往进展缓慢的材料基因组问题上，人工智能方法能以‘全数据’优势克服材料基因组数据收集的困难，更好地对材料的配方、工艺、结构和性能之间的普遍关系进行探索。”

与此同时，材料学领域在传统范式下一直面临体系复杂度高、数据标准化程度低、研究链条长等问题。

对此，中国科学院院士、北京大学副校长张锦表示，高精度、多维度数据处理正是

人工智能技术所擅长的，因此可能会为材料数据库的标准化、材料基础研究的全局性和材料跨越实验室到产业化的鸿沟提供助力，革新材料研究范式。

尽管人工智能为化学研究领域带来了技术突破和传统范式的潜在革新，但现阶段仍面临诸多挑战。

“数据质量和数量不足、算法与化学知识融合不足、实验与实际应用之间脱节、高昂的计算资源消耗和模型复杂性等，都是亟须解决的难题。”白春礼指出。

为此，他认为未来人工智能与化学的深度融合将聚焦于深入解析化学反应的微观机制，比如通过人工智能预测新的反应路径，发现新的反应类型与合成方法等，以及加速新药和新材料的研发，优化物质的筛选、设计与合成过程，推动化学工业可持续发展。

“人工智能的技术进步令人瞩目，但我们必须清醒认识到，通用人工智能的实现并非一蹴而就。”中国科学院院士、南京大学党委书记谭铁牛表示，这个过程需要吸取历史的经验教训，理性务实地推进人工智能的发展与应用。

谭铁牛强调，人工智能赋能化学领域创新发展不应局限于生成式人工智能的赋能，更应在基础大模型的基础上，着力推进知识和数据双驱动的多任务多目标垂直模型建设。

科学储粮推动我国农户储粮损失率降至3%左右

本报见习记者李晨近日，全国粮食和物资储备工作会议在北京召开。《中国科学报》记者在会上了解到，国家粮食和物资储备局通过指导农户科学储粮，优化粮食产后服务，助力农民减损增收，使我国农户储粮损失率降至3%左右。

减少农户储粮环节的损失损耗，是推进粮食产后节约减损的重要一环。国家粮食和物资储备局有关负责人介绍，近年来，国家通过投资引导，累计为全国农户配置科学储粮器具近1000万套。粮食和储备部门出台了推动解决“地趴粮”问题的具体措施，指导做好粮食产后短期储存，逐步消除“地趴粮”。“地趴粮”是一种粗放的粮食储存方式，指将粮食直接堆放在自家庭院、空地或露天场所，不进行进一步防护和处理，这种方式容易导致粮食损失和品质下降。

各地积极采取措施，着力引导农民在田间地头、房前屋后搭建科学储粮器具，保障储粮安全，减少粮食损失损耗。河北深入开展科学储粮“百社”“百户”行活动，推广简单实用的农村“土专家”储粮技巧和储粮仓型。福建实施农户科学储粮工程，投资1.52亿元建设35.6万套储粮罐，有效防止农户存粮被鼠虫咬。广西在全自治区20个乡村振兴重点帮扶县免费发放农户科学储粮仓44.8万套。

“截至目前，相关调查数据显示，我国农户储粮损失率已经降至3%左右。”该负责人表示。

国家粮食和物资储备局通过深入推进优质粮食工程，支持建设5500多家粮食产后服务中心，基本实现产粮大县全

覆盖。2023年，各地粮食产后服务中心保障夏粮、秋粮收购，积极为农民提供粮食产后清理、烘干、收储、加工、销售等服务，减少粮食损失超过200万吨。

近年来，我国大力推进仓储设施建设，仓储设施硬件基础不断夯实，绿色储粮技术应用范围不断扩大，目前基本形成与粮食生产、储备和流通相适应的粮食收储保障体系。

粮食仓储设施规模逐年递增，有效满足粮食收储需要。截至2023年末，全国粮食标准仓房完好仓容超7亿吨，较2014年增长了36%。

绿色储粮功效和性能不断升级。“十四五”以来，我国新建和改造升级仓容超6500万吨，仓房气密、隔热等关键性能明显提升。

绿色储粮技术应用水平大幅提升。国有粮库普及应用粮情检测、机械通风、环流熏蒸、谷物冷却“四合一”储粮技术，控温、气调、有害生物综合防治等应用范围不断扩大。依托国家科技计划，聚焦智能粮情测控、虫害绿色防控、粮食低温智能粮情、粮食清选等重点，加强关键技术攻关，解决绿色储粮技术难点问题。

“目前，粮库储粮损失基本消除，粮食储藏周期内综合损耗率控制在1%的合理预期范围内，粮食储存正在向绿色、优质、保鲜高质量发展阶段迈进。”该负责人表示。

下一步，国家粮食和物资储备局将统筹推进科技平台建设、成果培育转化，促进产学研用深度融合，因地制宜发展新质生产力。



1月6日，在新疆乌鲁木齐220千伏红光变电站，一台智能机器人和运维人员正在对变电站内设备进行特殊巡检，确保电网“迎峰度冬”期间供电设备安全稳定运行。

当日，国网乌鲁木齐供电公司利用“智能机器人巡检+人工特巡”对变电站开展运维保供，确保电网设备在低温大负荷下安全稳定运行。

该智能巡检机器人拥有红外测温仪和可见光摄像机，不受天气影响，可辅助人工24小时不间断巡视电网，改变了人工巡检时间长、及时性差、可靠性低的状况，有效减轻了运维人员工作强度，为电网“智能化”运维提供技术保障。

图片来源：视觉中国

太空碎片激增，“撞车”风险如何预测？

■本报记者 袁一雪

地球大气层外充斥着大量太空垃圾，威胁人造卫星、空间站等航天器的安全。伴随着巨型星座的快速发展，航天发射越来越多，太空垃圾只增不减。为避免太空垃圾产生的碎片损坏航天器，世界主要航天国家和机构都在尝试预测碎片的运行轨迹，以规避碰撞风险。

近日，在中国科学院云南天文台从事博士后研究的舒鹏与合作者借鉴流体力学欧拉视角，发展了一种完全概率密度表征的碎片云演化建模方法，在地球静止轨道碰撞碎片云的短期演化和风险分析方面取得了新进展。

借鉴流体力学欧拉视角

跟随个体运行轨迹、对单个目标进行研究，传统的离散化模型在过去太空目标数量较少时被广泛应用。近年来，随着太空目标密度增加，碰撞和爆炸等解体事故层出不穷，毫米级到厘米级的小尺寸碎片出现指数增长态势，其运动轨迹呈现出明显的不确定性特征，这种离散化模型面临结果一致性差、计算成本激增等挑战。

“离散化模型对捕获不确定事件具有

天然的不敏感性。”舒鹏告诉《中国科学报》，“所以我们采用欧拉视角建立连续性模型，这是一种思想上的转变。”

舒鹏解释说，量子力学中有“海德堡测不准原理”，揭示了微观粒子运动中的不确定性。由于很难描述电子绕原子核的运动轨迹，物理学家转而采用电子云图，描述电子在空间中不同位置出现的概率。

依据这一原理，研究人员不再执着于预测碎片个体绕地球运动的轨迹，转而关注碎片云出现在各个空间位置的概率。据介绍，欧拉视角就是将空间划分为一个个小网格，再描述出各个网格中的物理状态和输入输出情况。这种方法适宜模拟大尺度大变形的动态行为。

针对地球静止轨道解体事故的模拟

“我们这次发表的论文是针对地球静止轨道解体事故的模拟。”舒鹏说。

地球静止轨道是距离地球3.6万公里左右的轨道，上面分布着一圈卫星，其运动始终与地球的自转保持同步。从地面向上望去，它们像静止不动似的，这对于通信和气象卫星具有独特的价值。与距地面几百

公里远的低轨卫星可以在多个高度层和轨道面“杂乱”分布相比，所有的地球静止轨道卫星只能在赤道上方“围”成一个单独的圈，这意味着附近的太空物体相对较少。

2024年10月9日，研究团队将这篇论文投给《国际宇航学报》。巧合的是，就在10天后，美国一颗名为Intelsat 33E的地球静止轨道卫星突然发生异常。不久后，美国太空军确认该目标已解体。因此这篇论文也引发了编辑的关注。

“地球静止轨道由于位置有限、资源宝贵，所以由国际电信联盟统一分配‘席位’。拥有配额的卫星部署将功能比较重要、价值比较高的卫星部署在上面。我们的论文模拟了一次比较严重的解体事故，出发点是考虑这样的事件有可能给地球静止轨道卫星群体带来‘团灭’的风险。”舒鹏说。

研究结果显示，高轨航天器与毫米级碎片碰撞的概率可能会在解体36小时内增加到百分之十，而与5厘米以上碎片的碰撞概率可能达到十万分之一。“太空碎片的飞行速度很快，即便很小的碎片也会对航天器造成严重损害。比如，毫米级碎片可能损坏卫星太阳帆或电源系统，而厘米级碎片则可能摧毁整颗卫星。”舒鹏表示。

持续关注太空解体事故

舒鹏一直专注于以连续性方法预测太空垃圾碎片的演化态势，曾于2022年和2023年在国际期刊《导航、控制与动力学》发表过3篇论文，系统性发展了欧拉视角下的解体碎片云连续演化模型。

“我们的研究主要有两个用处。一是太空事故应急处置。针对突发的太空解体事故，快速分析出解体碎片密度较高的区域，对经过该区域的航天器发出预警，帮助航天器规避。传统的地面观测预警手段受区域覆盖率和尺寸分辨率的限制，存在时间滞后等问题——有时甚至滞后五六天才观测到解体碎片，新模型在事故早期就能进行预警。二是突发碎片观测调度。以模型给出的密度分布为指导，可预知解体碎片出现在空间区域的概率，进而在有限的测控资源条件下监测最多的新生碎片。”舒鹏说。

接下来，研究团队将继续关注高轨道区域对太空解体事故的敏感性，以及低轨道区域巨型星座的部署是否会引发“雪崩式”的级联碰撞效应等问题。

相关论文信息：
<https://doi.org/10.1016/j.jaastro.2024.12016>

发现·进展

中国科学院深圳先进技术研究院

超声指挥细菌—细胞生物机器人助力药物递送

本报见习记者刁雯蕙中国科学院深圳先进技术研究院研究员蔡林涛团队和乌腾团队开发了一种具有自主缺氧感知和超声响应功能的细菌—细胞生物机器人(PR-robot)，通过缺氧靶向联合超声操控，实现肿瘤深层渗透并生成肿瘤特异性血栓，最终实现高效精准治疗。相关论文近日发表于《生物技术趋势》。

微纳生物机器人是实现精准医疗和复杂生物任务的理想工具，但如何有效控制其运动和功能仍是一个研究难点。而超声在深层生物组织中具有良好的穿透性，能够实现非侵入式、远程精确操控，安全性高，因此在微纳生物机器人领域具有重要的应用潜力。

据介绍，PR-robot具有较长的体内循环时间，可自主靶向肿瘤区域，提高肿瘤特异性富集效率。同时，红细胞的特殊结构增强了PR-robot的声阻抗，使其能够以生物集群方式被超声精确控制和驱动，甚至穿越生物屏障，深度渗透到肿瘤组织内部。生物群的涌入诱导肿瘤特异性血栓的形成，协同光热细菌增强光热抗肿瘤效果。

研究团队进行了体外和体内实验，以验证生物群的超声可控性和深度渗透的有效性以及生物安全性。研究显示，超声能够精准操控PR-robots形成生物群集，还能精准操控生物群沿着既定路线自主运动，甚至在逆流中前进。而生物群可在超声操控下有序穿越屏障，实现深度渗透。

在小鼠研究中，PR-robots被从尾静脉注射入体内后，能够利用细菌的缺氧感知能力和红细胞的保护作用，高效靶向肿瘤区域。研究人员通过超声镊捕获PR-robots，并驱动生物群向肿瘤组织内部渗透，随着PR-robots的涌入，肿瘤组织内部形成大量肿瘤特异性血栓，可协同增强光热治疗效果。

该微型生物机器人的开发为基于超声驱动控制的药物深层递送，以及相关疾病的治疗提供了全新的技术手段和设计理念。

相关论文信息：<https://doi.org/10.1016/j.tibtech.2024.11.018>

中国科学技术大学

研发新型聚合物多层膜实现降温节水

本报见习记者王敏近日，中国科学技术大学教授刘文、特任副研究员李明课题组提出了一种基于聚合物多层干涉原理的光谱选择性辐射冷却膜(PMF-RC膜)。相关成果发表于《美国化学会—光子学》。

随着全球变暖加剧，高温干旱天气频发。持续性高温干旱环境使农作物长期处于热应激状态，从而影响农作物产量。微雾喷淋、湿帘风机等传统降温方式往往需要消耗大量能源和水，因此需要一种被动式降温节水策略，以优化农作物生长的局部环境。

研究人员介绍，PMF-RC膜由两个不同的聚合物多层膜系和一种透明聚合物辐射制冷材料组成，可选择性透过用于农作物生长的光合有效辐射，反射植物叶片利用率较低的绿光和近红外光，具有优异的辐射制冷性能，实现零能耗降低空气温度、土壤温度和土壤水分蒸发量，并显著提高高温环境下作物的产量。

在户外测试中，相较于传统的覆盖农膜，使用PMF-RC膜覆盖后，空气温度下降了2.3至5.0℃，土壤表面以下3厘米处的温度下降了2.1至4.1℃，土壤水分蒸发量下降了11.2%至32.4%。在实际的作物种植实验中，在PMF-RC膜下生长的生菜、意大利生菜和中国小青菜的产量均有1至3倍的提升。

相较于传统的真空镀膜技术，PMF-RC膜采用微纳层叠多层共挤技术制备，具有显著的成本优势和更快的制备速度。除此之外，PMF-RC膜还具有优异的耐老化性能和力学性能，十分适合在温室农业生产中广泛应用。

这项研究推动了聚合物辐射制冷材料在农业种植领域大规模实际应用的进程。

相关论文信息：<https://doi.org/10.1021/acsp Photonics.4c02043>

南方医科大学珠江医院等

揭示癫痫潜伏期激活神经保护新机制

本报见习记者朱汉斌近日，南方医科大学珠江医院神经外科中心副主任医师王军团队与合作者揭示了癫痫潜伏期激活神经保护新机制。相关成果发表于《先进医疗材料》。

作为一种常见的神经系统疾病，癫痫的发病机制复杂，治疗难度大。目前，抗癫痫药物的主要机制包括抑制兴奋、调控电压门控离子通道以及增强突触抑制。然而，这些机制主要针对神经元的异常放电，未能从根本上消除癫痫的潜在病因。

因此，深入研究癫痫的病因并设计创新治疗策略显得尤为迫切。这需要应对两个关键挑战：提高对癫痫发作前事件的检测敏感性并进行早期干预，以及增强脑组织在癫痫发作期间对严重缺氧等应激事件的耐受性。

研究团队提出了一种活性氧响应级联纳米体系(RRCN)，旨在通过靶向清除活性氧，利用人体的内源性生化反应，将活性氧和L-精氨酸转化为一氧化氮，降低癫痫发作的严重程度，延长发作周期。

该研究通过清除癫痫发作前产生的活性氧，并将其转化为可耐受剂量的氧化氮进行预处理，在潜伏期激活神经保护机制，增强癫痫发作期间对氧化应激的耐受性。研究表明，RRCN显著降低了癫痫发作的严重程度，延长了癫痫发作的潜伏期和发作周期。

进一步机制研究表明，RRCN是通过影响小胶质细胞的动态变化及其与神经元的相互作用实现的，这种作用由NO/HIF/ERK2通路介导。RRCN可通过预处理小胶质细胞的动态变化抑制癫痫发作。

相关论文信息：<https://doi.org/10.1002/adhm.202403700>