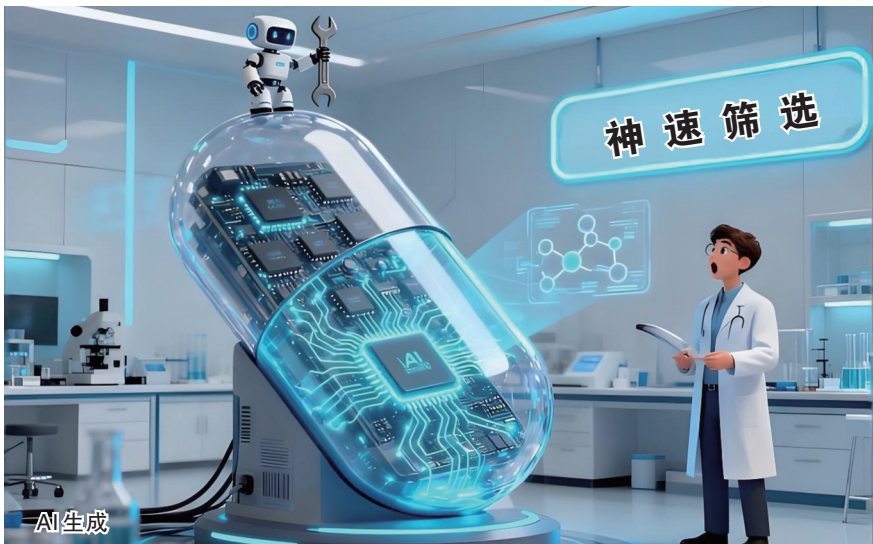


新药研发有了超级“加速器”



一颗救命新药从实验室到药架,平均需要十年时间和数十亿元的投入。如今,这个漫长旅程的第一站——从海量化合物中找出有潜力的候选分子,中国科学家只用了几十秒。

前些天,国家超级计算天津中心与清华大学团队联合发布了面向超大规模药物发现的人工智能虚拟筛选平台——GalaxyVS。依托新一代天河超级计算机,平台能在几十秒内从近千亿级的化合物库中完成筛选,有望彻底打破人类新药研发速度门槛。

换个思路,告别“翻书筛选”

药物研发的第一步,是找到能跟人体内某个致病蛋白“对上眼”的小分子。

传统做法叫“分子对接”——把候选分子一个个放到蛋白上试,看谁结合得好。这种方法精度不错,但面对如今千亿级别的可合成化合物库,就像在图书馆里逐本翻书找答案:一轮筛选下来,动辄数月甚至数年。

GalaxyVS的颠覆性思路,是把“逐一试配”变成“并行检索”。平台以人工智能模型为基,将蛋白口袋和小分子同时映射到同一个高维向量空间——可以理解为给每个分子和蛋白都生成一个独特的“特征指纹”。这样一来,寻找匹配的分子就变成了在向量空间里快速检索最相似的指纹,传统方法里串行计算的瓶颈被打破。

这套系统跑在天河超算上,依托国

产智能计算框架,还突破了超大规模存储的瓶颈。实测结果显示, GalaxyVS 的日吞吐量相当于完成约 16 万亿次传统分子对接——比当前国际最快的超算纪录高出整整一百万倍。

也就是说,过去需要几年才能完成的虚拟筛选,现在几十秒就能出结果。

不仅要快,还要“慧眼识珠”

有人可能会疑惑:速度这么快,筛选的结果会不会“粗制滥造”?

毕竟,超大化学空间里隐藏着一个常见陷阱:快速筛选很容易让结果集中在少数结构相似的分子上,候选库看似庞大,实际差异却很小,药用价值大打折扣。

GalaxyVS 专门设计了应对方案。它在检索过程中主动引入“多样性控制”——基于分子指纹对化合物库进行结构聚类,确保筛选出来的分子覆盖不同的骨架类型,避免“近亲繁殖”。同时,系统还搭配了一套高保真的亲和力预测模型进行二次精排:先用超快速度粗筛一遍,再用更高精度的模型对候选分子重新打分排序,让速度和准确性可以兼得。

这意味着, GalaxyVS 平台能为肿瘤、神经退行性疾病、新发传染病、罕见病等领域的先导化合物发现提供全新路径,在突发公共卫生事件中还可以大幅缩短药物研发的应急响应窗口。

当然,虚拟筛选只是新药研发的第一关,从候选分子到真正上市,还要闯过毒理测试、动物实验、三期临床试验等重要关卡。 GalaxyVS 能做的,是让这条赛道的起跑线尽可能前置,并且送上起跑线的选手质量更高。 据《科普时报》

“大号蒲公英”别吹!

近日,在北京等地的公园、郊野路边,出现了一种外形抢眼的“大号蒲公英”。它个头高大,蓬松的白色“毛毛球”竟有拳头大小,酷似普通蒲公英。不少人疑惑:这究竟是不是蒲公英?能不能吹,听中国科普作家协会会员冉浩给我们普及一下。

这种形似大号蒲公英的植物,并非蒲公英,而是长喙婆罗门参,为菊科两年生草本植物,原产于欧洲和西亚等地区。我国本土虽也有婆罗门参类植物,但集中分布在新疆地区,国内多数地区出现的应为这种外来物种。

目前,长喙婆罗门参已被列入《中国外来入侵植物志》,其危害程度尚待进一步评估。该物种早在 20 世纪 30 年代就已传入我国辽宁,早期主要在北京以北(如大连等区域)生长。

进入 21 世纪后,长喙婆罗门参快速传播,如今华北、江浙和新疆等多个地区均有其身影。它主要依靠种子随风散播,以及苗木跨区域运输无意携带实现远距离传播。

与蒲公英有何不同

二者外形特征差异显著。长喙婆罗门参植株挺拔,高度可达数十厘米,叶片窄又细,黄色花朵外围环绕尖刺状苞叶,繁殖能力极强,单株开花最多达 14 朵,平均每株能结出种子约 90 枚。而普通蒲公英植株矮小、贴地生长,没有明显的茎,只有基生叶。

会不会影响本土植物

长喙婆罗门参适应能力强,耐干旱、耐贫瘠,对生长土壤要求较低。在入侵过程中,它严重排挤本土物种,容易形成单一优势植物群落,大面积覆盖生长区域,破坏当地原有植物结构与生物多样性。

此外,长喙婆罗门参有与我国本土婆罗门参植物近缘种杂交,繁育出入侵性更强后代的风险,有污染本土物种基因库的风险。

当前,长喙婆罗门参在国内仍处于快速传播阶段,科学防控、及时清理尤为重要。人工清除是现阶段最有效防控方式。成片生长的植株必须彻底铲除并销毁。长喙婆罗门参再生能力极强,残留的根系和茎叶均可重新生根发芽,必须彻底清除,杜绝残留植株复生。

植株结籽前的苗期是最佳清除窗口期。若延误至结籽后清理,须防范搬运、振动产生的外力造成种子脱落扩散而加剧蔓延,引发次生危害。

另外,这类“大号蒲公英”千万别吹!吹散果球相当于协助外来入侵物种扩散传播。同时,不要把它当作新奇观赏植物种植在室内或庭院,避免种子逃逸扩散。

近年来,城市大规模改造、河道清淤等工程较多,大量裸露空地出现植被空缺,竞争压力小,为长喙婆罗门参种子落地、生根繁殖提供了有利条件。

是否可以食用

在伊朗等西亚地区,确实有食用长喙婆罗门参的历史,也有药用的传统,但在国内尚缺乏充分的安全评估。这类植物大多生长在路边、荒地等复杂环境中,土壤污染、卫生状况等情况不明,存在极大健康隐患,不建议随意采摘、食用。

据《科普时报》

“车内换座”啥意思

最近有旅客发现,自己买的中转换乘车票,到了换乘站却不用下车,只需换个座位就能继续走。这是怎么回事?

旅客在 12306App(以下简称 12306)选购中转车票时,可选 3 种换乘方案:同城换乘、同站换乘、车内换座。

“车内换座”是指乘坐同一趟车,分段购票,中途不用下车,直接在车内换座位。购票时系统会提醒,你只需要按

照第二段行程的座位信息,找到新座位就行。

旅客在购买显示“车内换座”的车票时,还可能会遇到车次发生了变更。这种情况不用担心,只要确认还是同一列火车,到站后不用下车,直接换座位即可。唯一要注意的是重联列车:8 号车厢和 9 号车厢之间不连通。如果你要从 8 号车厢前往 9 号车厢,必须先下车,通过

站台走到对应车厢再上车。

想确认自己乘坐的列车是否会变更车次,或是方便家人接站,可用这两种方法:

车站大屏查询。打开铁路 12306,点击“车站大屏”模块,输入车次即可查询信息;

时刻表查询。打开 12306,点击“时刻表”模块,输入车次和出发时间即可查询。

据中国科普网

“无目的地海上游”可以说走就走啦

前些天,全国首张“无目的地海上游”出入境通行证在上海签发。这是经国家移民管理局批准同意,上海公安出入境管理部门在全国率先推出的助力邮轮游出入境办证便民新政。

提起传统邮轮旅行,不少人的第一印象是:请长假、办签证,还要辗转多个港口,实在有点“折腾”。

“无目的地海上游”就是邮轮从上海出发、最终返回上海,全程不停靠任何港口,只在公海巡游。周六出发、下周一清晨返回的三天两夜邮轮游,游客无需办理签证,拎包“说走就走”。这种玩法不再把邮轮当成“去往远方的交通工具”,而是直接把邮轮本身变成“周末休闲目的地”。

乘坐传统出境邮轮,游客必须持护照。而“无目的地海上游”因全程“不靠

岸、海上巡航”,旅客仅凭身份证,就能申办专用出入境通行证登船,实现了从“必须持护照”到“通行证可出行”的历史性突破。

该通行证为单次出入境有效证件,证件上会专门标注“无目的地海上游”。上海市公安局出入境管理总队证件管理一支队支队长叶骏介绍,旅客可携带身份证,前往民生路出入境接待大厅申办此通行证;对于出行时间紧张的旅客,大厅还开设绿色通道,提供加急办理服务。

承担“无目的地海上游”任务的是首

艘国产大型邮轮“爱达·魔都号”,它如同一座吃喝玩乐一应俱全的“海上小城”。本次航次围绕演艺、派对、微醺、运动、美食五大主题,畅享昼夜不停的沉浸式狂欢。

船上玩法多样:知名调酒师现场演绎花式调酒;海上篮球赛、高空绳索、水滑道等运动项目全部开放;美食 24 小时供应,自助餐、西餐、海鲜、烧烤一应俱全。此外,船上还设有大型海上免税店与特色市集,旅客可随心选购。

据中国科普网

