

分子筛选效率达行业标准两倍 新机器学习算法有助药物开发提速

科技日报伦敦2月12日电(记者田学科)英国剑桥大学研究人员设计出一种新的机器学习算法来寻找药物,其效率已被证明是目前行业标准的两倍,有助新药开发提速。研究成果发表在近期出版的《国家科学院院刊》上。

药物发现的关键点是预测分子是否会激活一个特定的生理过程。可以通过搜索激活生理过程的分子之间共享的化学模式来建立统计模型,但是目前构建这些模型的数据十分有限,因为实验成本高且不清楚哪

些化学模式具有统计学意义。“机器学习在数据量丰富的计算机视觉等领域已经取得了重大进展。”项目主要负责人、剑桥大学卡文迪许实验室的阿法·李博士说,将其运用到药物发现领域,就是为了解决数据量相对有限的问题。

被称为随机矩阵理论的数学原理,给出了关于随机和噪声数据集统计特性的假定,用这一原理可以将活性和非活性分子化学特征的统计数据进行比较,以确定哪些化学模式对于结合而言是真正重要的,哪些只是偶

然的。

根据这一设想,研究团队与辉瑞制药公司合作开发出一种算法,即利用数学运算,将与药理学相关的化学模式从不相关的化学模式中分离出来。重要的是,该算法不仅研究已知具有活性的分子,而且也不放过那些无活性的分子,并且学会识别分子的哪些部分对于药物作用是重要的,而哪些部分是不重要的,使得那些失败的实验(数据)也可以得到有效的利用。

研究人员用222个活性分子开始建模,已

能够从计算角度对其他600万个分子进行筛选。由此,研究人员从中筛选出100种最相关的分子,再从这些分子中找到了4种可以激活可能与阿尔茨海默病和精神分裂症有关的CHRM1受体的新分子。

“从600万个分子中筛选出4种活性分子,就像在大海捞针一样,”李博士说,“详细比较显示,新算法效率是行业标准的两倍。”目前研究人员正在完善该算法,预测合成复杂有机分子的方法,以及将机器学习方法扩展到新材料设计领域。

确保“科学强国”地位 法国首份国家研究战略呼之欲出

今日视点

本报记者 刘霞

据英国《自然》杂志官网2月11日报道,法国政府宣布,将于2021年开始实施首份国家研究战略。尽管细节仍未敲定,但法国政府表示,该战略旨在为各级科学家尤其是年轻科学家提供稳定的资金资助和更好的职业前景,以帮助法国在全球科研竞争日益激烈的国际大背景下脱颖而出,是“确保法国仍是科学强国”的重要机会。

此举受到法国主要研究机构负责人的热烈欢迎。不过,也有科学家持谨慎乐观态度。他们认为,对于法国研究来说,增加新投资至关重要。

首份国家研究战略呼之欲出

2月1日,在庆祝法国国家科学研究中心(CNRS,欧洲目前最大的基础研究机构)成立80周年大会上,法国总理爱德华·菲利普首次宣布,法国将制定首份长期国家研究战略。菲利普认为,该战略将削减官僚作风,为科学家(尤其是年轻科学家)提供更多资金和资源,使他们能够更好地规划未来并腾出更多时间开展研究,从而帮助法国在竞争日益激烈的全球科研中脱颖而出。

目前,已有包括CNRS在内的14家法国公共研究机构掌门人发表联合声明,对此举表示热烈欢迎。这些负责人表示,在国际研究竞争——尤其是来自亚洲的竞争从未如此强烈的时代大背景下,最新战略将是“确保法国仍然是一个科学强国”的重要机会。

去年7月,一项法国议会实况调查任务,为这份国家研究战略提供了理论支持。科学



法国总理爱德华·菲利普在法国国家科学研究中心创建80周年大会上宣布,将制定首份国家研究战略。

家、研究负责人和议会成员目前正就该战略提供咨询,其将以一项国防战略为蓝本,各个工作组将对法国的研究资金、人力资源等的现状进行认真分析,以改善年轻科学家的科学职业前景以及公共和私营部门之间的联系,从而促进创新。

有望增加研究预算资金

长期以来,法国科学家一直抱怨,他们的研究预算随政治形势的波动而波动,这也是该战略旨在解决的一个问题。

该战略可能会写入政府拟于2021年通过的一项法律中。法国高等教育与研究部部长的一名顾问在2月1日的新闻发布会上表示,

该计划的细节仍是未知数,但目前已知的情况是,这一战略将至少历时3年,并且可能会与欧盟的下一项主要研究资助计划——“欧洲地平线2021—27”项目重合。

菲利普并没有特别提到该战略是否会为科学研究提供新资金,但该名顾问声称,研究预算的增加是战略的一部分。该战略的目标是将法国的公共和私人研究支出提高到国内生产总值的3%,而过去4年,这一比例仅为2.2%。

该顾问表示,这份战略反映了政府对科学的投入和承诺,“以前的政府都曾表示,科学研究是国家的优先发展战略,但没有一个人采取行动。这一次,政府终于真正行动起来了。”

各方反应不同

对于这项新战略,法国研究界的反应并不相同。

巴黎笛卡尔大学校长、分子生物学家费雷德利克·达尔代尔说:“对于这一战略,我非常乐观,也非常欢迎,我特别期待能早日看到这份战略的具体细节,特别是有关预算的规模以及雇佣年轻科学家的政策等。”

他补充说,因为该长期战略可能会在2022年总统大选之前实施,所以,无论谁获胜,研究政策和资金的稳定性都应该可以得到保证。

但有些人则更为谨慎。法国国家科学研究交易联盟(SNCS)秘书长帕特里克·蒙福特说:“我们一直希望能够实施一项持续时间超过15年的研究支出计划,希望10年内研究支出每年能增加10亿欧元,而新战略并未明确指出会增加研究预算。”

蒙福特也担忧地表示,此外,“黄背心”运动(2018年末每周在法国举行的示威活动)促使政府不得不减税,以安抚抗议者,所谓“城门失火,殃及池鱼”,这可能导致今年晚些时候有些研究的预算被冻结。

他进一步指出:“我认为,国家研究战略也可能采取一种新的集中式的机制,或许不会有更多现金提供给实验室,无法为各级科学家(不仅仅是年轻科学家)提供更好的薪酬和工作条件,总而言之,可能并不会比现在更好。”

由一群从事高等教育和研究工作的人士组成的RogueESR组织则表示,希望政府能宣布更多信息,而且,在该战略的细节制定之前,情况可能“一切照旧”。RogueESR目前正在组织一场活动,抗议CNRS每年仅雇用250名而非300名永久雇员,他们起草的一份请愿书已收集到约1.2万个签名。

(科技日报北京2月13日电)

美“超期服役”探测器将充当火星车与地球“联络员”

科技日报北京2月13日电(实习记者胡定坤)发射一次火星探测器不容易,已经“过期”的探测器废弃了也很可惜。日前,美国国家航空航天局(NASA)宣布,早已“超期服役”的MAVEN(火星大气与挥发物演化任务)探测器将降低火星轨道高度,为预计2020年着陆的“火星车”充当中继作用。

据悉,NASA研究人员将采用气动刹车技术将MAVEN的远火点高度从6200公里降低到4500公里,从而缩短MAVEN与未

来火星车之间的距离,增强通信信号强度。此外,轨道调整将缩短MAVEN轨道周期,从每天5.3圈变为6.8圈,通信频率也将显著提升。

接下来的几天内,MAVEN将首先使用推进器减速,将其轨道的最低部分降到火星高层大气中。在随后的两个半月里,MAVEN将环绕火星飞行360圈,每一圈都会因大气阻力稍微减速。在之前的任务中,MAVEN曾经进行过9次气动刹车。MAVEN首席研究

员布鲁斯·雅各斯基表示,虽然气动刹车耗时较长,但它是改变航天器轨道最有效的方法,这种方法消耗的燃料很少。

MAVEN于2013年11月发射,2014年9月进入火星轨道,主要任务是探测火星大气并调查其流失情况。MAVEN的设计寿命是运行两年,但四年多时间过去,其仍在正常运行。与其他火星探测器类似,MAVEN也携带一个超高频无线电收发器,它可以在地球和着陆火星的探测器间传递数据。MAVEN

已经偶尔为NASA与“好奇”号探测器的通信充当“联络员”。NASA计划优化MAVEN燃料使用策略,使其运转到2030年,以充分发挥其通信中继功能。

NASA火星探测项目主任吉姆·沃特辛表示,MAVEN探测器已经做出了非凡的工作,告诉我们火星是怎样逐渐失去大气的,并为研究火星气候的演变提供了新的科学观点。现在,我们将使用它来帮助NASA与未来的火星探测器通信。



莫斯科大雪封林。据莫斯科市水文气象中心发布的信息,12日至13日一夜之间,莫斯科市降雪量超过了月正常水平的四分之一。通常情况下,2月份的降雪量为36毫米。估计13日全天的降雪量将达15毫米。大雪严重影响了莫斯科市民的出行,道路交通拥堵指数达到了7级。

本报驻俄罗斯记者 董映璧摄

NASA卫星数据:世界比20年前更绿 中国和印度贡献最大

科技日报北京2月13日电(记者马爱平)美国国家航空航天局(NASA)12日介绍了一项最新研究称,卫星数据分析结果表明,世界比20年前变得更绿,中国和印度在全球绿化方面的贡献最大。自2000年以来,全球绿叶面积增加了5%,相当于一个亚马孙热带雨林,中国和印度贡献了三分之一的增长。

波士顿大学教授兰加·迈内尼及其同事在20世纪90年代中期首次注意到了NASA卫星数据中地球绿化现象。他们开始追踪地球植被覆盖总面积及其随时间的变化情况。研究称,最近的卫星数据(2000年至2017年)显示,中国和印度境内的绿化带非常醒目。

“当第一次观察到地球的绿化时,我们认为这是由于气候变暖、更潮湿和大气中增加的二氧化碳造成的,但通过NASA的卫星数据,我们发现人类也有贡献。比如在全球绿

化增长中占主导的中国,其雄心勃勃的植树计划和集约化农业对地球绿化面积增长作出了非常大的贡献。植树计划占到了中国绿化贡献的42%,这些计划旨在减少土壤侵蚀、空气污染和气候变化的影响。”迈内尼说。

他表示:“这篇研究意义重大,中国和印度的例子告诉我们,人类活动可以直接影响地球的植被面积,人类活动应该被纳入气候模式的研究之中,这样有助于科学家更好地进行地球活动的预测,从而引导人类在解决气候变化和污染问题时,作出更加明智的决策。”

NASA的Terra和Aqua卫星长达20年的数据记录,给这项研究提供了坚实的数据基础。该研究以《中国和印度通过土地使用管理为绿化地球作出贡献》为题,发表于11日的《自然·可持续发展》杂志。

科技日报北京2月13日电(记者张梦然)据英国《自然·通讯》杂志13日发表的一项气候变化研究,美国科学家团队绘制了2080年的540个城市的“气候地图”——即为这些城市2080年的预测气候找到了最为相似的当前区域气候。研究团队还在此基础上开发了一款网络应用,能让用户搜索到每个地区的详细结果。

全球气候变暖对人类影响巨大,但很多人对于其还缺少基本的认知。鉴于此,马里兰大学环境科学中心研究人员马修·菲兹帕特里克和罗伯特·敦恩,通过绘制气候相似“地图”(将某地区的未来气候预测与其他地区的当前气候进行匹配),形象展示了气候变化将如何影响2080年约2.5亿居民的生活。例如,如果排放在2040年前后达到峰值,那么2080年华盛顿的气候与目前美国阿肯色州帕拉戈尔德的气候最为相似。

研究人员还基于两个排放轨迹对540个城市(包括530个美国城市和10个加拿大城市)的“气候地图”进行了绘制——一种排放轨迹将在整个21世纪持续增加,另一种排放轨迹会在2040年左右达到峰值后开始下降。

研究团队发现,如果排放量在整个21世纪持续增加,平均而言,北美城市气候会最接近现在850公里以外(方向以向南为主)的地区气候。但是研究人员也发现,许多城市未来的预测气候和与其最为相似的当前气候之间依然存在很大差异。这表明,到2080年前,以北美地区为例,城市可能会出现当前所没有的全新气候状况。

科学家希望,这一研究结果能以直观的方式让公众对气候变化会给城市居民带来何种影响有更多的认识。

未来的事儿,谁说得清楚?全球排放、气候变化的科学数据理性而真实,但当这类提醒越来越频繁,反而出现了公众对这一议题敏感性降低的趋势。从这个角度讲,用直接对比的方法,让公众了解所处环境未来走向何方,这个成果或许是最接地气的气候变化研究了。

查APP可知二〇八〇年北美城市气候



年轻行星圆盘中发现大量有机分子

科技日报东京2月13日电(记者陈超)韩国庆熙大学和日本东京大学组成的联合研究小组,利用阿尔玛望远镜对围绕年轻恒星猎户座V883的气体和尘埃构成的圆盘(原始行星圆盘)进行观测,发现了甲醇、乙醚、丙酮等多种有机分子。这颗恒星正处于急速增长状态中,所以圆盘内温度升高,被困在冰里的多种有机分子化为气体释放出来。这项研究为探索原行星盘中所含的有机分子提供了重要线索。

科学家在观测太阳系中彗星和小行星时发现,太阳系中存在丰富的有机分子。尤其彗星是岩石和冰的聚合物,含有大量的水和有机分子。在太阳系悠久的历史中,地球经历过多次彗星撞击,因此调查彗星成分对了解地球形成极为重要。那么彗星的成分是从何而来的呢?

彗星和行星,是由围绕诞生不久的恒星周围的原始行星圆盘中的气体和尘埃聚集而生成的。原始行星圆盘越接近恒星,其温度越高,反之越寒冷。在外侧的低温区域混有各种有机物质和水的冰黏附在灰尘表面,由岩石和冰构成彗星。可以通过观察原始行星(圆盘)上冰的成分来探究彗星成分的由来。

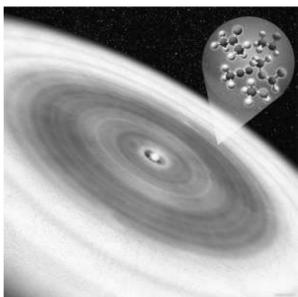
研究小组观察了距地球1300光年的年轻恒星猎户座V883。这是一颗正在增长中的年轻恒星。由于周围圆盘降下大量物质,恒星急剧变得明亮。这种急剧明

亮的星一般只持续100年左右,因此处于增长中的星较为罕见。

研究小组观测V883周围圆盘,发现了复杂的有机分子,包括甲醇、乙醚、甲酸甲酯、乙醚、丙酮、环氧乙烷、甲酸和甲烷硫酸,其中丙酮首次在原始行星圆盘中发现。

与一般原始行星圆盘相比,猎户座V883的圆盘中这些分子与氢的丰度比高出1000多倍。

研究成果近期发表在《自然·天文学》杂志网络版。



环绕猎户座V883的原始行星圆盘想象图。阿尔玛望远镜在冰融化部位检测出复杂的有机分子。

图片由日本国立天文台提供

以色列将建环保和可持续发展创新实验室

科技日报特拉维夫2月12日电(记者毛黎)据以色列当地媒体报道,以色列创新署、环保部和经济产业部决定,共同支持建立致力于环境保护和可持续发展的创新实验室。政府预计在该项目上的总投资为380万美元。

报道称,被选中参与实验室建设和运行的以色列国内外公司以及参与创新活动的初创公司将获得政府的资助。中标享有实验室3年运行权的公司所获得的资助为技术基础设施建设总开销的33%。此外,政府还将提供50%的持续运营成本,最高可达每年13.7万美元,优先考虑支持那些为人口中心高污染加工和制造业提供解决方案的实验项目。

以色列创新署自2017年开始实施实验室激励计划,目前已建成5家实验室,它们专注于自动化技术、智能基础设施和建筑、制造技术、新材料和打印以及食品技术领域的创新。计划建立的环保和可持续发展实验室将是第6家。在计划框架下,创新署将启动竞争性招标程序,环境保护部

将为新实验室提供数据、信息和监管协助。

创新署副署长兼初创部门负责人安亚·阿尔丹表示,期望创新实验室能发展成独特的集初创公司、投资者和以色列以及跨国公司为一体的整体生态系统,帮助创新技术的实施并利用行业的丰富经验来影响实验室。

环保部规划、政策和战略高级副总裁加利特·科恩认为,创新实验室项目旨在促进早期企业的发展,是环保部在推动以色列环境技术和支持成熟项目概念的商业验证方面的重要和附加层。实验室还将为传统行业提供可以应用的创新环境技术,以改善以色列的环境成效。

经济产业部工业管理负责人奥兹·卡茨说,经济和工业部通过众多援助计划促进环境和新兴产业,这个实验室就是其中之一。实现环境可持续性目标具有巨大的经济潜力,包括更高的生产率和工业创新。新实验室将推动更可持续的制造流程,并将创新方法用于满足基于行业的环境需求。