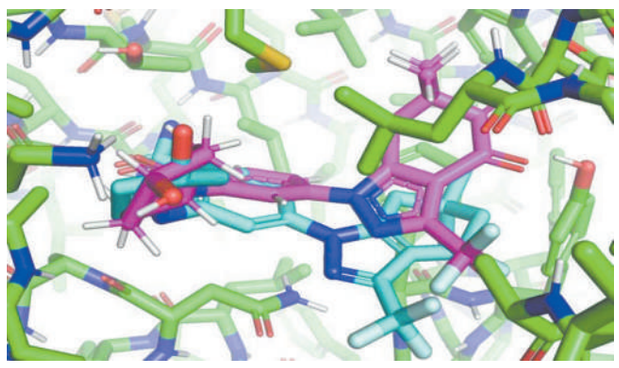
一步完成蛋白和配体配对

深度学习模型筛查新药快千倍

科技日报北京7月13日电（记者**刘霞**）据美国麻省理工学院（MIT）官网12日报道，该校科学家开发出一款名为EquiBind的几何深度学习模型，其将类药物分子与蛋白配对的效率比现有最快的计算分子配对模型QuickVina2-W快1200倍。相关研究已经提交预印本服务器，并将提交给国际机器学习大会。



EquiBind（蓝绿色）能高效预测可与蛋白对接的配体。
图片来源：MIT网站

在药物开发之前，研究人员必须找到有潜力的类药物分子，这些分子可以与某些蛋白质靶点正确结合或“对接”——这一过程被称为药物发现。类药物分子（配体）成功与蛋白质对接后，可以阻止蛋白质发挥功能。如果蛋白质是细菌的一种必需蛋白质，配体就可以杀死细菌，从而保护人体。

目前寻找潜在药物候选分子的计算过程大致如下：大多数最先进的计算模型依赖繁重的候选采样，以及评分、排序和微调等方法，从而让配体和蛋白质之间实现最佳“匹配”。

最新研究主要作者、MIT电气工程和计算机科学系研究生汉尼斯·斯塔克表示，上述传统的配体—蛋白质结合方法就像“尝试将钥匙插入有许多锁孔的锁中”。这种方法需要花费大量时间对每个“锁孔”进行尝试，才能找到最佳匹配。相反，EquiBind仅需一个步骤就可以直接精准预测配体与蛋白质配对的精确位置，这是因为其拥有内置的几何推理能力，可以帮助模型了解并学习分子的基本情况，在遇到新的数据时能够进行概括，以做出更好的预测。

该研究引起了专业人士的兴趣。接力医疗公司首席数据官帕特·沃尔特斯建议其团队在现有的一种用于肺癌、白血病和胃肠道肿瘤的药物和蛋白质上尝试这一最新模型，结果EquiBind取得了成功——而大多数传统的配对方法无法让蛋白和配体成功配对。

沃尔特斯说，EquiBind为配对问题提供了一种独特的解决方案，它结合了姿态估计和结合位点识别。这种方法利用了数千种公开可用的晶体结构的信息，可能对药物开发领域产生新的影响。

机器人学会『从头开始』想象自己

自我建模将引领更先进的自主系统

科技日报北京7月14日电（记者**张梦然**）美国哥伦比亚大学工程学院研究团队13日宣布，他们创造的一个机器人首次能够在没有任何人类帮助的情况下，从头开始学习其整个身体的模型。在《科学·机器人学》发表的该项研究中，研究人员描述了他们的机器人如何创建自身的运动学模型，然后使用自身模型来规划运动、达到目标并在各种情况下避开障碍物，它甚至会自动识别并补偿对身体的伤害。

研究人员将机械臂放置在由5个流媒体摄像机组成的圆圈内。机器人通过摄像头观察自己，自由地摆动。就像婴儿第一次在大厅镜子里探索自己一样，机器人摆动和扭曲以了解它的身体是如何响应各种运动指令而移动的。大约3个小时后，机器人停了下来。它的内部深度神经网络已完成了机器人运动动作与它在环境中占据的体积之间的关系的学习。

哥伦比亚大学机械工程教授兼创意机器实验室主任霍得·利普森说，人们真的很想知道机器人是如何“想象”自己的，但人们不能只窥探神经网络，因为这其实是一个“黑匣子”。而机器人在没有工程师协助的情况下进行自我建模的能力很重要。它不仅可节省劳动力，还可让机器人跟进自身的磨损，甚至可检测和补偿损坏。

研究团队认为，这种能力之所以关键，是因为人类需要自治系统更加自力更生。例如，工厂机器人可检测到某些东西没有正确移动，并进行补偿或寻求帮助。

利普森解释说：“自我塑造是一种原始的自我意识形式。如果机器人、动物或人类拥有准确的自我模型，它就能在世界上更好地发挥作用，作出更好的决策，并具有进化优势。”

无论是前几天的AI学习像婴儿一样接触物理世界，还是本文机器人开始像稚童一样审视自己，将自我意识授予机器、让它拥有更大自主权，此事都关乎巨大的风险和争议。幸好科学家们已经充分认识到这一点——研究团队就明确指出：这项成果目前展示的那种自我意识，与人类相比微不足道，但即使这样，也必须缓慢而谨慎地前行，才能在将风险降至最低的同时，让人类真正获得收益。

总编辑圈点
环球科技24小时 24 Hours of Globle Science and Technology

抗疫失败 美国暴露卫生系统各自为政弊端

今日视点

◎本报记者 刘霞

5月12日，美国总统拜登在白宫网站发表声明，纪念美国新冠逝者达到100万的悲剧性里程碑。这是美国历史上的“至暗时刻”，也标志着美国抗疫的巨大失败。

医疗技术领先、医疗资源丰富的美国，在抗疫中的表现为何如此糟糕？美国无党派、非营利性组织民福基金（Commonwealth Fund）近日在《英国医学杂志》（BMJ）发表报告称，美国如此高的新冠病亡率，以及该国未能解决的药物过量、糖尿病和孕产妇死亡率等公共卫生问题，暴露出美国各级公共卫生系统各自为政的弊端。

抗疫失败 损失惨重

民福基金是一个私人非营利基金会，支持卫生政策改革和高效卫生系统的独立研究，该基金会公共卫生专家委员主席为美国食品和药物管理局前局长玛格丽特·汉堡。

民福基金向BMJ提交的报告称，超过100万美国人死于新冠肺炎，美国新冠病亡率位居全球前列。民福基金的报告提出：“新冠肺炎这场灾难在美国的规模如此之大，美国亟须采取应对措施，保护数百万人免受新冠疫情和未来的紧急情况的影响。”

美国《华盛顿邮报》网站近日报道，7月10日前一周，美国疾病控制和预防中心（CDC）报告的日均新增病例多于10万例。但密切跟踪疫情走向的斯克里普斯研究所埃里克·波托尔教授说，传染病专家们知道真实数据远不止于此。有美国官员警告说，可能会在今年秋季或冬季暴发感染潮，届时美国的感染人数可能多达1亿，将令医院应接不暇。

各自为政 错漏百出

报告指出，尽管美国有近3000个州、地方和地区卫生部门，但卫生和公共服务部并没有一个人或一个办公机构来领导和协调这些卫生部门的工作，导致它们各自为政，效率低下。

美国是联邦制国家，实行联邦、州和地方政府三级管理。新冠疫情等公共卫生事务属于各州事务，以州和地方政府为管理主体。在这样的体制下，美国很难制订出全国统一标准的新冠疫情应对措施。比如，2022年，佛罗里达州就裁定，CDC强制乘坐公共交通系统的乘客佩戴口罩为“非法”。《福布斯》双周刊网站称，美国21个州“迫不及待”地要求取消口罩令有可能导致新冠病例激增。

报告进一步强调称，由于检测结果延迟发布以及收集数据的方法过时，导致各州在跟踪新冠疫情方面存在差距。此外，在大流行期间，“虚假的信息洪流广泛传播，且有些是故意传播的”。美国政府在制订相关指南和交流准确信息方面同样存在问题。

报告明确指出，美国缺乏一个能够保护和改善健康、促进健康公平、应对个人紧急情况的国家公共卫生系统。

美国总统拜登5月12日在白宫网站发表声明说：“今天，我们纪念一个悲剧性里程碑：100万美国人死于新冠。”图为当日在纽约时报广场，电子屏上播放关于新冠逝者的新闻。
新华社发（郭克摄）

加大投入 刻不容缓

要想改变应对新冠疫情的劣势，民福基金的报告提出美国应刻不容缓地创建一个国家级公共卫生系统。

报告建议，美国卫生和公众服务部应成为创建国家公共卫生基础设施的中心，公共卫生基础设施应服务于所有人，无论他们住在哪里。此外，国会应为州、地方和地区卫生部门提供可靠、稳定的资金，因为这些部门存在资金长期不足、人手短缺且缺乏现代数据系统等痼疾。

民福基金呼吁，美国应加快建设一支公共卫生队伍和一个现代公共卫生信息系统。而且，这一国家级医疗保健系统应与各级公共卫生系统更密切地合作，以便在紧急情况以及平时定期共享数据。

报告认为，美国公共卫生系统的领导人需要更多地参与社区和共同决策，支持社区组织并与其开展有效沟通，以解决错误和虚假信息等问题，重新获得公众的信任。

6月19日，在纽约展望公园六月节庆祝活动现场的一个临时帐篷里，举行了一场悼念新冠逝者的拼布活动。
新华社发（郭克摄）

啄木鸟“咚咚咚”却不会脑震荡之谜揭开

科技日报北京7月14日电（记者**张梦然**）长期以来，科学家们一直想知道啄木鸟为何能够反复用力敲击树干却不损伤它们的大脑，目前一种看法是，它们的头骨应该像减震头盔一样。14日发表在《当代生物学》杂志上的论文驳斥了这一观点，计算表明，任何“减震功能”都会阻碍啄木鸟的啄食能力，实际上啄木鸟的头部更像是硬锤。

比利时安特卫普大学研究人员范·瓦森伯格说：“通过分析3段啄木鸟的高速视频，我们发现啄木鸟其实不会吸收与树木撞击带来的冲击。”

瓦森伯格及其同事量化了3种啄木鸟啄树过程中的冲击减速，并利用这些数据建立了生物力学模型，从而得出结论，头骨的任何减震都会对鸟类不利。但如果它们的头骨不起到减震器的作用，那么“狂暴”的啄树动作为何不会让它们的大脑受伤？

研究证明，虽然每次啄树的冲击超过了猴子和人类脑震荡的已知阈值，但啄木鸟较小的大脑却可以承受它。

研究表明，没有减震并不意味着啄木鸟的大脑在看似猛烈的撞击中处于危险之中。即使是超过100次的最强烈啄树冲击，对啄木鸟的大脑来说仍然应该是安全的——计算显示啄木鸟当时大脑的负荷依然低于遭受脑震荡的人类。

瓦森伯格指出，这些发现驳斥了长期以来在媒体、书籍、动物园中经常普及给大众的减震理论，即它们的头部装有“减震器”的说法。

从进化角度来看，这一发现也解释了为何啄木鸟的头部和颈部肌肉不大。同时该发现具有实际指导意义，因为工程师此前曾尝试借鉴啄木鸟颅骨的解剖结构作为开发减震材料和头盔的灵感来源，新发现表明这不是一个好主意。

泰雷兹、爱立信和高通计划启动5G太空项目

科技日报巴黎7月13日电（记者**李宏策**）7月11日，泰雷兹、爱立信、高通宣布启动5G太空项目，计划通过开发卫星网络，使智能手机用户无论身处世界何处，都能获得高速连接。

法国航空航天公司泰雷兹、瑞典电信设备制造商爱立信和美国芯片公司高通正在测试如何利用近地轨道（LEO）卫星运行5G网络，以帮助极端地理位置和偏远地区的个人接入互联网。

三方计划在4—5年内发射卫星，耗资可能达到80亿欧元。目前，该项目还处于起步阶段，三方分别进行了平行研究，即将进入地面测试阶段。预计最终网速可以实现“每秒几十兆比特”，速度介于4G—5G之间。

该项目最终可能会与美国SpaceX的卫星互联网项目“星链”展开竞争，但5G计划将使用不同的技术解决方案。“星链”已将2000多颗卫星送入轨道（目标为30000颗），大量低轨道卫星可能对太空安全构成严重威胁。但5G项目将依赖更大、更少的卫星来实现全球覆盖，最终可能需要600—800颗卫星。

分工方面，泰雷兹将建造卫星，爱立信将在地面安装网络核心，高通将提供测试智能手机并与低轨道卫星进行通信。泰雷兹负责战略的副总经理菲利普·克里尔对三方合作给予肯定，称“这将是电信领域的一场革命。此前，电信公司和卫星公司之间存在竞争，但现在这两个领域正在融合”。

克里尔指出，对于自动驾驶汽车等高度依赖网络的服务，不连续的网络是不可想象的。如果网络发生故障或无法覆盖，5G卫星可以为地面网络提供“补充”。

自4年前首次推出5G以来，全球已有210家电信运营商部署了5G。到今年年底，5G用户将突破10亿。但鉴于投资规模庞大，目前5G主要限于城市。偏远或人口稀少的地区很少或根本没有5G覆盖，更不用说广袤的海洋。

爱立信高级副总裁兼首席技术官埃里克·埃库登表示：“三方开展的测试与验证合作将成为通信史上的一座重要里程碑。通过5G卫星和地面网络的协作连接，用户无论身处海洋中央、偏远森林或是地球上的任何地方，都可以获得高速、安全且经济的网络连接。”

章鱼仿生手套可牢牢抓住水下物体

科技日报北京7月14日电（实习记者**张佳欣**）美国弗吉尼亚理工大学迈克尔·巴特利特领导的一个研究团队受章鱼的启发，开发出一种章鱼仿生手套，能够牢牢抓住水下物体。他们的研究被选为13日《科学进展》的封面。

任何曾试图在水中抓住游动的鱼的人都知道，人类在陆地上游刃有余的手指很难抓住水下物体。机械工程系助理教授巴特利特表示，大自然中，章鱼强大的粘合力是其灵感来源。

章鱼，又称八爪鱼，是地球上最独特的生物之一。它们的八只手臂可以在水生环境中抓住无数物体。这些手臂上覆盖着由肌肉和神经系统控制的吸盘，每个吸盘形状像柱塞的末端，提供了强大的抓取能力。在吸盘的宽阔外缘与物体形成密封后，肌肉收缩并放松边缘后面的杯状区域，以增加和释放压力。当许多吸盘贴住物体时，就会产生一种强力黏合剂。

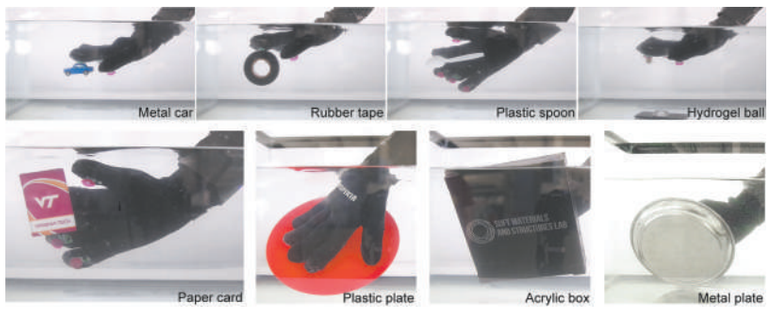
研究人员表示，章鱼可根据需要迅速激活和释放黏合剂，还可通过处理不同的化学和机械传感器的信息，控制着八只手臂上的2000多个吸盘。

此次，研究人员设计了一种可发挥与章鱼吸盘相同功能的手套，称为“八爪手套”（Octa-glove）。

通过将柔软的、响应性强的黏合材料与嵌入式电子设备（一组微型激光雷达光学接近传感器）相结合，研究人员使手套成功模拟了章鱼的神经和肌肉系统。只需要将手套移向一个物体，它就会对物体进行抓取。整个过程中，佩戴者无需进行任何按钮操作。

在测试中，研究人员利用手套迅速捡起和释放平板物体、金属玩具、圆柱体、曲柄勺子，以及超软的水凝胶球。通过重新配置传感器网络以利用所有传感器进行物体检测，他们还能够抓取更大的物体，如盘子、盒子和碗。由硬质和软质材料组成的扁平、圆柱形、凸面和球形物体被黏附并抓起，即使用户没有通过抓握来拾取物体。

研究人员表示，将来这种手套可能在水下抓取软机器人领域派上用场，也能用于相关辅助技术和医疗保健中，以及在组装和操控潮湿物体时发挥作用。



受章鱼启发设计的手套在实验室中拾取水下的各种物体。
图片来源：美国弗吉尼亚理工大学

新研究揭示记忆“拼图”存储位置

科技日报北京7月14日电（实习记者**张佳欣**）当你在餐厅吃了一顿难忘的晚餐后，脑海中留下印象的不仅仅是食物。气味、装饰、乐队演奏的声音、对话和许多其他特征结合在一起，形成了对当晚的独特记忆。此后，仅仅唤醒这些印象中的任何一种，可能就足以带回整个体验。13日发表在《自然》杂志上的新研究阐明了大脑中记忆处理的分布式本质，并为记忆回忆的过程提供了新见解。

研究表明，在大脑中，复杂的记忆同样由一个整体及其部分组成。虽然整体记忆存储在海马体中，但部分细节被解析并存储在其他地方，即前额叶皮质。

海马体一直被认为是记忆的所在地。然而，新发现表明，接触到任何单独的线索都足以激活前额叶皮质，再经由海马体回忆起整个记忆。这对阿尔茨海默病等疾病的治疗具有指导意义。人们认为阿尔茨海默病的缺陷更多地与回忆有关，而不是与记忆储存有关。研究人员说，大脑中存在单独的记忆存储和提取路径，这表明靶向前额叶回忆路径或更利于新疗法的开发。

将记忆作为一个分布式大脑过程来研究一直是个挑战，部分原因是技术上的限制。此次，美国洛克菲勒大学神经学家普里亚·拉贾塞图帕西及其同事开发了新的技术，可以同时记录和操纵多个大脑区域的神经活动。

实验中，小鼠在虚拟现实中无尽的走廊里进行多感官体验时，会遇到各种各样的视觉、声音和气味。研究人员训练小鼠将不同的房间（由不同的感官线索组合而成）联系起来，作为愉悦或厌恶的体验。随后，在一种特定的气味或声音的推动下，小鼠能够回忆起更广泛的体验，并知道是高兴地期待糖水，还是警惕一股恼人的空气。

此前已有研究表明，嗅觉记忆比其他感官记忆更强，这是因为嗅觉通路可与海马体直接“沟通”。但此次实验表明，当小鼠遇到特定的感觉特征时，一个不同的回路被激活。在这个回路中，前额叶神经元与海马体进行交流，以召唤相关的全局记忆。

该研究论文的第一作者纳库尔·亚达夫说：“这表明，回忆有一条专门的途径，独立于记忆的形成。”