

显微骨骼化石改写苔藓动物起源史

远古“海洋建筑师”提前5000万年登场

□ 张志飞 宋宝鹏

在地球漫长的生命演化史中,苔藓动物的起源一直是未解之谜。科学界普遍认为,这种古老的海洋生物诞生于4.8亿年前的奥陶纪,是奥陶纪生命大辐射的代表性生物。而西北大学地质学系早期生命研究团队的一项重磅发现,彻底改写了这一传统认知,将苔藓动物的骨骼起源时间向前推进了至少5000万年。

相关研究成果,北京时间6月3日23时在线发表于国际期刊《自然》。

苔藓动物俗称苔藓虫,是极具特色的群居水生生物,堪称远古“海洋建筑师”。它们几乎不独自生存,成千上万的微小个体聚集共生,搭建出形态各异的“集体公寓”——有的像铺在海底的薄薄地毯,有的像竖立的精致扇子或小树枝。每个“住户”都从自己的小房间里伸出一个由触手组成的“捕食网”,悠闲地过滤海水中的浮游生物大餐。

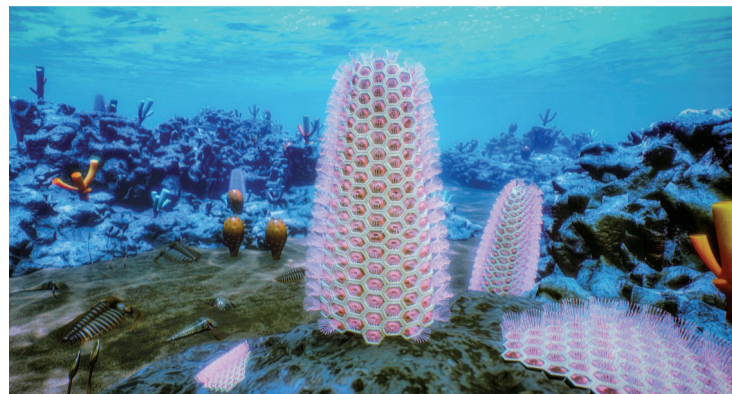
苔藓虫的躯体柔软易分解,很难在地层中留存。漫长岁月里,只有它们坚硬的钙质虫室能成为化石。正因如此,以往仅在奥陶纪及之后的地层中发现苔藓虫化石,科学界也由此笃定其起源于奥陶纪。

本次科研关键突破,依托陕南汉中寒武纪早期仙女洞组珍稀化石样本。经过酸蚀处理,

科研人员发现了大量磷酸盐化苔藓虫化石,其中不仅包含门房原始蜂巢虫化石,还确定了一种全新的苔藓动物化石属种——六方大营蜂巢虫。它们的群体形态完全不同,一种竖着成双排生长,一种铺成薄片,说明早在寒武纪早期,苔藓虫就分出了不同群居形态,为后来奥陶纪这类生物遍地演化埋下伏笔。

为精准追溯苔藓动物的演化脉络,团队搭建了专业分析模型,纳入50个关键形态特征,覆盖18种古今苔藓动物类群。经过系统发育分析证实,这批寒武纪化石属于苔藓动物门狭唇纲的核心类群,比此前发现的远古苔藓动物,更贴近古生代主流苔藓动物的演化特征。

这一成果不仅将苔藓动物矿化骨骼的化石记录从奥陶纪前移至寒武纪早期,同时也有力支持了舒德干院士团队提出的“三幕式寒武纪大爆发”假说——动物演化像一场分幕上演的大戏,基础动物、原口动物和后口动物三大类群,在前寒武至寒武纪早期依次登场,苔藓动物也是其中重要的一环。



寒武纪海洋中两种苔藓动物及其附着古杯礁的生态复原图。

作者供图

更有意思的是,该研究还解开了一个长期困惑:为什么在著名的澄江化石库和加拿大的布尔吉斯页岩这类深水泥质环境保存的化石宝库中,几乎找不到苔藓动物——早期的苔藓动物,更喜欢生活在清澈的浅海硬底质环境中。

此次发现,为地球动物树成型和寒武纪生命大爆发提供了新的证据,也在提醒科学界:单一的特异化石库无法还原完整生命演化史,不同类型的化石研究,是解锁地球生命起源奥秘的关键。

(作者张志飞系西北大学地质学系教授,宋宝鹏系西北大学地质学系在读博士研究生)

从几年到几十秒,新药研发有了“加速器”

□ 科普时报记者 陈杰

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。

5月30日,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。



AI制图

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础,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和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、三期临床试验等重重关卡。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。