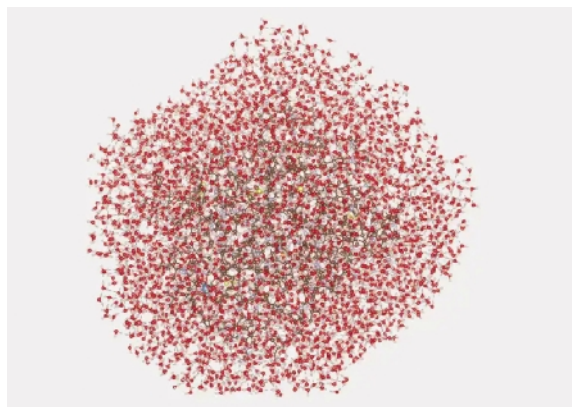


# 量子计算机联手超级计算机模拟迄今最大分子

**本报讯** 量子计算机最具前景的应用方向之一是模拟蛋白质,助力新药研发,但目前量子计算机太容易出错,无法完成这项工作。如今,在超级计算机的协同配合下,两台量子计算机打破了一项模拟纪录,成功确定了一个包含12635个原子的分子的性质。相关研究成果近日公布于arXiv。

要弄清药物分子的作用机制,科学家们必须确定它们的电子的量子态与能量。这是一个通常只能在常规计算机上大致解决的量子问题。

在这项研究中,美国克利夫兰医学中心、科技公司IBM与日本理化学研究所的研究人员组成的团队另辟蹊径,依托“掌握”量子物理学基本原理的量子计算机,研发出一种混合运算方案,能够将量子计算机和传统超级计算机结合起来,并用它们来模拟两个前所未有的大分子,其中一个分子是以往用量子计算



模拟的大分子包含12635个原子。 图片来源:IBM

机模拟的最大分子的40倍左右。

团队成员、克利夫兰医学中心的Kenneth Merz表示:“这一直是我的研究梦想,如今终于得以实现。”

研究团队使用了分别部署于日本理化学研究所与克利夫兰医学中心的两台IBM“苍鹭”量子计算机,以及两台全球顶尖超级计算机“富岳”与“雅比-6”。

研究人员选取了两种蛋白质与小分

子的组合,即蛋白质-配体复合物作为模拟对象,后者已得到了充分研究,并且在生物医学领域常被用作基础研究范例。他们同时还在水中进行了模拟,使结果更贴近于实验室的真实环境。

现阶段的量子计算机实用价值有限,这是因

为它们的体积相对较小,而这限制了算力,并且更容易出错。为此,该团队将分子模拟运算任务拆给4台机器,仅用量子计算机计算出分子某些片段的特定性质,再将运算数据交由超级计算机处理,整个计算过程是在两类计算机之间进行的,时间超过100个小时。IBM的Jerry Chow表示,即便如此,这套混合方案依旧比没有量子计算机的情况下要快。

这次模拟还对分子的最低能量进行了测算,其精度已达到主流标准运算方法的水准,只是尚未形成绝对优势。

美国匹兹堡大学的刘俊宇(音)评价称:“该研究给出了一些极具参考价值的东西,即依托现有硬件推进实用的量子计算的步骤。实验的规模确实令人印象深刻。”

刘俊宇认为,在研制出低错误率的量子计算机之前,这类混合运算模式值得大力推广。但目前仍存在一个悬而未决的问题:暂时无法通过严格的数学论证,证实这种混合方案在任何场景下都能保证优异的性能,即所谓的量子优势。

Chow表示,这次创纪录的大分子模拟仅是第一步,且不是决定性的。“当下,整个行业都在不断突破现有技术边界。最让人振奋的是,量子计算实用化之路才刚刚开始。”

(王方)

相关论文信息:<https://doi.org/10.48550/arXiv.2605.01138>

## 全球首个心肌细胞再生人体临床试验启动

**本报讯** 科学家正在开发一种全新的心脏再生基因疗法,为治疗心力衰竭这一常见病带来了希望。

全球首个旨在培育新生心肌细胞的临床试验已经启动,同时多家企业还在研发至少4种用于心脏病的再生基因疗法。英国爱丁堡大学的Andrew Baker评价道:“这是首批走向临床的人体心脏再生研究,这个领域令人满怀期待。”

不过兴奋之余,科学家也保持谨慎态度。美国斯坦福大学的Sean Wu指出,哺乳动物心脏的自我修复能力很差,“实现心脏再生一向困难重重”。部分科研人员质疑,现有临床试验的数据并不能证明心肌细胞真的通过分裂完成再生。然而美国弗吉尼亚大学的Antonio Abbate认为,开发这类基因疗法难度极大,但“我们必须坚持研究,相信总有一天会取得成功”。

心力衰竭指心脏无法泵出足够血液来满足身体需求,如今这种病在一些国家变得越来越普遍,以美国为例,预计未来15年患病率将上升50%。目前市面上的药物仅能缓解症状,无法根除疾病。

2007年,首个针对心力衰竭的基因疗法临床试验启动,但它并未着眼于心脏再生,而是致力于增强心肌细胞的收缩能力。如今,科研人员的目标不仅是优化心肌细胞功能,还要诱导细胞增殖,希望通过增加心肌数量恢复心脏活力。

第一个进入临床试验的再生疗法借助病毒将RNA片段送入心肌细胞。这类RNA可结合SAV1基因,后者表达的蛋白质能够抑制细胞分裂。二者结合后能大幅阻止SAV1基因的表达,解除对心肌细胞增殖的抑制。

美国得克萨斯心脏研究所的James Martin主导了这项研究。他表示,在小鼠和猪的动物实验中观察到明确的心肌细胞分裂现象。

该研究显示,在猪心肌梗死模型实验中,这种疗法将射血分数(衡量每次心跳泵血量的指标)提升了14%。这份实验数据使该疗法获得了美国监管机构的批准。

然而,一些研究人员对此持怀疑态度。Martin团队主要通过观察DNA复制现象,判定猪体内的心肌细胞正在分

裂。有人提出,心肌细胞有时会生成第二个细胞核,目的是增加蛋白质产量,而这一现象很难与“因细胞分裂形成的第二个细胞核”区分开来。

Martin承认,确实需要更多细胞分裂的直接证据,而且他的实验对照组未接受标准药物的治疗。但他表示,该研究已采用了当下最先进的检测手段,如今只有开展人体试验才能提供最终的答案。对于外界的质疑,他没有感到意外,并认为这在一定程度上源于该领域充满争议的去。

21世纪初,美国心脏病学家Piero Anversa团队接连发表多篇论文,称心脏内存在可分化为心肌的干细胞。2018年,其所属的哈佛医学院与布莱根妇女医院联合调查认定,Anversa发表的31篇论文存在伪造、篡改数据的问题。美国国家心肺血液研究所随即叫停了一项基于该研究开展的临床试验,Anversa的实验室也被关闭。据“撤稿观察”数据库统计,目前他已有19篇论文被撤稿。

Martin表示,这起学术丑闻让整个心脏再生领域陷入艰难处境。“可想而

知,想要申请科研经费、发表论文都格外艰难。”尽管历经波折,但该领域的科研探索并未停止,布局心脏再生基因疗法的生物企业也越来越多。

英国伦敦国王学院的Mauro Giacca在意大利都灵成立了Heqet Therapeutics公司,研发微小RNA类药物。这类极短的RNA片段包裹在脂质纳米颗粒中,靶向进入心肌细胞。Giacca表示,其中3种微小RNA潜力突出,可同时解除两道“枷锁”——既可激活细胞增殖,也能促进心肌细胞骨架的生长。该疗法预计两年内启动临床试验。

另有3家基因疗法公司也在研发基于微小RNA的疗法,分别采用病毒载体或水凝胶进行递送。其中一种微小RNA可让心肌细胞进入人类胚胎状态,另外两种则用于解除不同的细胞增殖抑制机制。

加拿大渥太华大学的Darryl Davis评价道:“这类研究属于突破式探索。如果不开展临床试验,我们的心脏疾病治疗手段将一直停留在三四十年的旧模式里。”

(王方)