超级计算机能找到新冠肺炎的“解药”吗

齐鲁晚报齐鲁壹点
记者 王昱

面对在全球愈演愈烈的新冠肺炎疫情,早日研发出针对这种病毒的疫苗和特效药,成为全球民众的企盼。最近,一则消息显示,超级计算机可能会帮助人类更快地摆脱此次疫情。3月23日,美国白宫科技政策办公室宣布,美国将启动全美16台超级计算机,不分昼夜破解新型冠状病毒,帮助科研人员尽快找到对病毒有效的特效药物和疫苗。那么,超级计算机能帮助人类找到新冠肺炎的“解药”吗?

超级计算机是什么

3月23日,美国白宫科技政策办公室宣布,美国将启动全美16台超级计算机,不分昼夜破解新型冠状病毒,以帮助科研人员尽快找到对病毒有效的特效药物和疫苗。

据悉,包括全球最先进的“Summit”等超级计算机都将投入到这场疫苗攻坚战中,预计总运算能力高达33亿亿次浮点运算。美国首席技术官迈克尔·奎迪奥斯特别强调,美国正齐心协力攻克新型冠状病毒,并释放出全球第一的超级计算机全部运算能力,迅速推进有关治疗和医疗领域的科学研究。

据报道,美国此次出动的“Summit”超级计算机于2017年建成,2018年夺走了“天河二号/太湖之光”保持了10年之久的全球超算冠军宝座,该计算机采用了IBM公司研发的Power 9处理器,运算能力高达20亿亿次。

作为耗资巨大的“国之重器”,超级计算机可以说是一种大国才能拥有的战略资源,美国此次宣布投入大批超级计算机,而且还是24小时破解冠状病毒,这从一个侧面也说明眼下美国人真的着急了。

超级计算机能够执行一般个人电脑无法处理的大资料量与高速运算。超级计算机的主要特点包含两个方面:极大的数据存储容量和极快速的数据处理速度,因此它可以在多种领域进行一些普通计算机无法进行的工作。

超级计算机能帮什么忙

问题是,超级计算机能在疫苗和特效药的研制中帮什么忙呢?

疫苗其实是灭活或减毒的病毒,将病原微生物及其代谢产物,经过人工减毒灭活或利用转基因等方法制成。

在生物、医药领域里,超级计算机应用主要涉及蛋白质研究、基因比对、药物筛选、器官模拟等。具体到疫苗研制过程中,在超级计算机的助力下,科学家有望能够更快地找出病毒内的致病基因片段,进而对病毒基因进行针对性加工,让设计出的疫苗更具有效性和安全性。

事实上,早在2016年,美国华盛顿大学等研究机构的研究人员就通过超级计算机获得过一种促进冠状病毒进入细胞的突起蛋白的原子模型,对该模型进行分析或可为开发抵御新型冠状病毒感染的特殊疫苗提供新思路。

此外,超级计算机在研发针对新型冠状病毒的特效药中也有望能大显身手。

从原理上讲,特效药之所以能够迅速缓解和治疗某项疾病,是因其有效成分通过与体内的生物靶标相互作用而发挥药效。但在过去,人类寻找有效成分的唯一途径是进行一次次的试验,靠“大海捞针”筛查出对生物靶标有效的某种化合物。

超级计算机能够根据药物靶标结构来计算设计小分子配体,甚至通过计算机内的“模拟试验”进行筛查,这可大大降低创新药物前期研发的成本与周期。

分离毒株、药物筛选、新药研发等也需要进行大量的数据分析和科学超算工作。超级计算机具有强大的CPU及GPU算力调度能力,能够为基因测序、医疗工程提供稳定高效的算力支持,从而降低创新药物前期研发的成本与周期。

从原理上讲,药物通过与体内的生物靶标相互作用而发挥药效,若能够根据药物靶标结构来计算筛选和设计小分子配体,将可大大降低创新药物前期研发的成本与周期。针对新型冠状病毒的多个靶点,通过超级计算机的高性能计算、存储资源,快速计算筛选数亿级别的化合物数据库,结合试验验证,来寻找新型结构类型的先导化合物,就能为下一步新药研发工作提供依据。

眼下,借助超级计算机的高性能计算、存储优势,如果能针对新型冠状病毒的多个靶点快速计算筛选数亿级别的化合物数据库,结合试验验证,来寻找新型结构类型的先导化合物,就能为下一步新药研发工作提供依据。

不过,无论疫苗还是特效药,超级计算机依然只是通过海量计算帮助人类尽量设计出一款较为安全、完备的测试品。至少从理论上说,动物测试和人体临床试验的“门槛”依然要过,超级计算机所能做的,是在一些团队决心冒险直接跨过这些门槛时,提高可能性。

在月球上“蹭”GPS总共分几步

未来月球或许将有自己的卫星导航系统

◀“月球导航”示意图

美国太空网等媒体近日发布消息称,为实现重返月球的目标,美国国家航空航天局(NASA)科学家开始进行“月球导航”验证。他们表示目前地球轨道上的GPS卫星发射的信号,在月球上可以接收使用,定位精度能达到200米至300米。

在月球上竟能用“蹭”到的GPS信号导航?这个方法能行得通吗?

地球导航卫星信号,能让月球“沾光”

众所周知,导航卫星的信号波束都是朝向地球发射的,想在月球上接收到导航信号,前提是卫星、地球、月球三者的位置关系满足一定要求。

不妨想象一幅画面:假设导航卫星是一盏灯,从地球“前面”发出圆锥形的光束照向地球,那么当月球运行到地球“斜后方”一定位置时,就能被漏过来的光线照到。导航卫星的信号主波束正是这样一个圆锥形,不仅能覆盖地球,而且范围还稍宽一点。地球挡不住的信号,就能让月球“沾光”。

GPS星座由24颗卫星组成,它们均匀分布在6个轨道面,在距离地面20200公里高度的中圆轨道上飞行。能把信号传向月球的概率并不低,但可能不足以支持月球上的探测器像在地球一样导航。

大家在生活中使用导航软件时都知道,要实现准确定位,对能接收到信号的导航卫星数量有要求,通常至少需要四颗以上卫星。在航天器定位概念中,这种通过接收多颗卫星信号实时计算自己位置的方式被称作几何定轨。

月球上的航天器显然无法保证能同时“蹭”到四颗GPS卫星信号,这就需要采用另一种定位方式——动力学定轨。比如月球航天器在1点钟收到了A卫星的信号,2点收到B卫星信号,3点收到C卫星信号……它不可能实现几何定轨,但可以通过在一段时间内,收到几颗卫星在某个弧段发来的数据,最终计算出自己的轨道。只不过这种方式花费的时间较长。

此外,月球导航面临的核心问题是接收信号的强度。GPS卫星距地球2万公里,再到月球,距离可能达到40万公里左右,信号已经十分微弱。因此月球探测器上接收信号的天线要多大尺寸成为关键。要具备更强的信号接收能力,就需要大天线,但从航天器研制、发射角度来说,却希望天线越小越好,其中存在矛盾。不过,这并非无法攻克的技术难题,只是要多付出一些代价。

打造“月球导航卫星系统”

事实上,自从人类开展航天活动以来,航天器的测轨、定位就必不可少。以探月活动为例,美国阿波罗任务主要是基于地面的测控进行导航定位。

近年来,人类重燃探月热情,其目的也由半世纪前主要服务于政治转向开发月球资源,因此探月活动将更为复杂。例如NASA正在为宇航员重返月球做准备,其前期任务包括在月球南极附近的火山口中开采冰层,获取水用于生活并分解为燃料所需的氢和氧。这都需要具备较为精确的定位能力,这也正是他们希望利用GPS导航的原因。

其实不光NASA,多国航天专家都在开展月球导航研究。未来实现这一目的最直接有效的途径,是各国合力在近月空间建设时空基准,具备定位、授时功能。简而言之,就是打造一套“月球导航卫星系统”。

截至目前,人类在探月活动中使用的导航定位手段效果都不是很好,有的代价也很大,很难满足未来的月球开发需要。如果未来能在月球附近,例如地月拉格朗日1点、2点、月球两极以及绕月轨道等位置部署几颗导航卫星,就能够为环月飞行器和月球着陆器等提供精确的位置、速度信息和时间基准,从而让探月活动更加安全、便捷。这也将是未来月球基地建设的重要组成部分。

(据《科技日报》)