

高效挑选靶向虚拟筛选高质量受体结构的新型算法

比传统方法更简便 显著降低计算成本

本报讯(记者 陶慧 通讯员 周圆 刘伟东)近日(8月21日—25日),美国化学会第252届秋季年会在美国费城举办。广东医科大学东莞科研中心副主任、中美肿瘤研究所副所长黄遵楠教授在会上作了题为《靶向蛋白虚拟筛选高质量受体的高效选择方法》(《Economic method for selecting high-quality receptor structures for target-based virtual screening》)的报告。

该研究提出一个新颖的计算机辅助药物设计靶向虚拟筛选受体结构的优

选算法,该算法只考虑对接已知的活性分子到受体结构,而不考虑大量诱饵化合物从而可显著降低计算成本并且应用范围最广,有望成为一个挑选高质量受体结构的标准方法,相关研究成果已刊登在国际知名学术期刊《化学信息和模型》(《Journal of Chemical Information and Modeling》)上。

目前,计算机辅助药物设计的虚拟筛选被大规模应用于活性化合物的发现,是创新药物研究的核心技术之一,而靶向虚拟筛选的命

中率高低很大程度上要取决于所用受体结构的质量。现有测试蛋白结构好坏的经典计算方法是进行区分配体和非配体能力的实际虚拟筛选测试:将已知配体与大量非配体诱饵化合物组成数据库,然后进行筛选测试,检查配体能够成为先导化合物的几率。如果几率越大,配体排序越靠前,则其使用的受体结构可靠性越好。

研究中,黄遵楠教授及其团队则提出了一个新颖的受体结构优选算法和其筛选性能指数(简称SPI)。

该算法只通过测试受体结构与活性配体两两间的相互对接,计算每个受体结构的筛选性能指数,即与其对接良好的活性配体(结合能优于总体平均结合能)占有配体的比例。研究通过测试八个多样化的蛋白体系,证明了SPI能够很好地匹配在经典方法测试中用到的其它标准筛选效能指标如玻尔兹曼增强判别接收机特性曲线参数、累积曲线下面积和富集因子F等。

“比起传统挑选方法,新算法计算更简便、所需条件

更少,而且应用范围更广。新算法只需要十多个活性配体的存在,而无需使用诱饵化合物数据库,同时该方法同样可适用于从理论计算结构中来设计挑选高质量的受体结构,这是之前除经典方法外其它方法无能为力的地方。”黄遵楠介绍道。

记者了解,黄遵楠教授是广东医科大学在2012年引进的海外高层次人才,是2013年广东省扬帆计划“引进紧缺拔尖人才”,主要从事计算生物、药物设计和循证医学方面的科研工作。

健康新闻

国家卫计委发布《突发事件紧急医学救援“十三五”规划(2016-2020年)》

4个目标 5个重点

本报讯(记者 祁峰)国家卫生计生委近日发布《突发事件紧急医学救援“十三五”规划(2016-2020年)》。

《规划》提出了4个具体目标:县级及以上地方紧急医学救援队伍规范化建设90%以上达标,在全国规划布局建设7个国家紧急医学救援综合基地;各级各类紧急医学救援预案实现全覆盖,二级及以上公立医院应急管理专(兼)职机构设置全覆盖,各级卫生计生行政部门和县级及以上医疗卫生机构紧急医学救援信息规范化报告率达95%以上;全国开展紧急医学救援相关学科研究生学历教育的高等院校达10

个以上,从事紧急医学救援的医疗卫生专业人员培训率达90%以上,开展专业人员紧急医学救援相关培训的乡镇卫生院和社区卫生服务中心达70%以上;以地市为单位,在全国各省份开展紧急医学救援知识和技能普及活动覆盖率达70%以上。

《规划》提出,为实现以上目标,将在未来4年实施5个重点项目:国家紧急医学救援移动处置中心(帐篷队伍)建设,国家紧急医学救援队伍(车载队伍)升级完善,国家海上紧急医学救援基地建设,国家紧急医学救援综合基地建设以及突发中毒事件、核辐射事件紧急医学救援中心建设。

推动建立中国康复大学

发展康复高等教育 加快专业人才培养

本报讯(记者 祁峰)国务院新闻办公室近日召开新闻发布会,解读《“十三五”加快残疾人小康进程规划纲要》。国务院残疾人工作委员会副主任张海迪在会上表示,“十三五”时期,将推动建立中国康复大学,加快康复高等教育发展和专业人才培养,让更多的残疾人早日得到

康复服务。

张海迪说,据统计,2015年,全国有2600多万名持证残疾人,其中只有不到30%的人得到过康复服务。为此,建立国家级康复大学被写入《“十三五”加快残疾人小康进程规划纲要》,也被写进了残疾人小康专题规划。

国家新闻出版广电总局印发加强医疗养生类节目和医药广告播出管理通知

“三个严禁”严管医疗养生类节目

本报讯(记者 祁津)就当下一些节目存在的非法兜售药品、保健品和医疗服务以及播放虚假医药广告等问题,国家新闻出版广电总局日前印发关于进一步加强医疗养生类节目和医药广告播出管理的通知。

通知要求,医疗养生类节目只能由电台电视台策划制作,不得由社会公司制作。严格医疗养生类节目备案管理,未经备案的医疗养

生类节目一律不得播出。

通知还要求,医疗养生类节目聘请医学、营养等专家作为嘉宾的,该嘉宾必须具备国家认定的相应执业资质和相应专业副高以上职称,并在节目中据实提示。医疗养生类节目主持人须取得播音员主持人执业资质,依法持证上岗。

通知提出“三个严禁”:严禁以介绍医疗、健康、养生知识等形式直接或间接发布

广告、推销商品和服务;严禁直接或间接宣传医疗、药品、医疗器械、保健品、食品、化妆品、美容等企业、产品或服务;严禁节目中以包括“栏目热线”以及二维码等在内的任何形式,宣传或提示联系电话、联系方式、地址等信息。

通知提出,严禁播出任何虚假医药广告的同时,严格限制医药广告播出的时长和方式。

中山眼科中心联合白云区卫计委“两学一做”白内障义诊活动成功举办

中山眼科白内障义诊走进钟落潭卫生院

本报讯(记者 王智锦 通讯员 魏春福)2016年9月2日下午,中山大学中山眼科中心白内障科义诊活动走进广州市白云区钟落潭卫生院,本次活动得到了白云区卫计委及钟落潭卫生院的大力支持。

据悉,本次白内障义诊活动由中山眼科中心白内障科主任吴明星及白内障科教授郑丹莹带队,中山眼科中心白内障科医生护士一行约15人,主要是针对白内障为主的眼科疾病进行义诊。吴明星介绍,在“两学一做”的背景下,为响应“健康中国”的号召,他们不仅要到基层去帮老百姓看病,更重要的是把技术带到广州偏远的乡镇,推进基层医院的眼科医疗技术水平,使老百姓在家门口就可以

看病。他说:“我们坐落在广州市,理所当然应该为广州市的老百姓做贡献。”带着这一使命,中山眼科中心白内障义诊活动首站走进了钟落潭医院,此后还将在广州的偏远地区全面铺开,如白云区、萝岗区、黄埔区等,最大程度地方便老百姓。

吴明星表示,老人家的眼病主要是白内障,如今生活水平提高了,糖尿病高发,而糖尿病也可以引起眼部病变,如糖尿病性白内障及糖尿病眼底出血,均有致盲风险。他指出,50岁以上的人大多都有白内障,而白内障手术在老年人当中有一个误区,很多人认为一定要瞎了以后才能做,但现在的医学这么发达,如果是白内障病变导致视力在0.5以

下就可以做手术了。

郑丹莹介绍,到场的患者年纪较大,且经常劳作,在户外接收强烈的紫外线照射,白内障相当严重。谈及中小眼病,她认为主要是屈光不正,平常一定要注意用眼健康,不能对着手机看太久,经常到户外运动,而中年人要防护眼睛以免受伤。

由于交通不便,以及基层地区医院的医疗条件和医疗水平有所欠缺,很多白内障患者(尤其是老年患者)没有得到很好的治疗,眼疾的困扰已经严重影响生活。前来就诊的都是些上了年纪的老人,一位大伯告诉记者,自己的白内障有10多年了,生活中诸多不便,眼睛不好使还经常流眼泪,多亏了这些专家来帮自己看病。

记者了解到,此前,白云区卫计委及钟落潭卫生院已经做了大量准备工作,筛查了部分白内障病人,当天到场的32名病人中经过中山眼科中心的专家诊断,其中15人需要做手术。下一步,中山眼科中心将为这15名患者进行免费手术。