



# 中文概要

2024 年第 54 卷第 3 期

## 分子动力学模拟中支持 CIF 蛋白质文件格式

王恒越, 张志勇 

(中国科学技术大学物理系, 安徽合肥 230026)


通讯作者: 张志勇, E-mail: zzyzhang@ustc.edu.cn

**摘要:** 分子动力学 (MD) 模拟能够以非常精细的时间分辨率捕捉蛋白质的全原子动态行为, 因此它已经成为蛋白质动力学研究的重要工具。当前有多种 MD 软件包被广泛使用。MD 模拟需要从一个蛋白质初始结构开始, 而初始结构一般来自蛋白质数据库 (PDB)。直到 2014 年, PDB 文件格式一直是蛋白质结构的标准格式。然而, PDB 格式存在一些内在缺陷, 例如以固定宽度存储结构信息, 这对于超大型蛋白质复合物来说存在问题。因此, CIF 文件格式被提出来替代 PDB 格式, 前者的特点是具有出色的扩展性。据我们所知, 目前主流的 MD 软件包只支持 PDB 格式, 而不直接支持 CIF 格式。在本研究中, 我们修改了一个 MD 软件包 GROMACS 的源代码, 使其能够支持输入 CIF 格式的蛋白质结构文件, 并生成拓扑文件。这项工作将简化大型蛋白质复合物 MD 模拟中的预处理过程。


**关键词:** 蛋白质数据库; PDB 格式; CIF 格式; 分子动力学模拟; GROMACS

**引用格式:** JUSTC, 2024, 54(3): 0301

## IDDNet: 一个基于双域深度交互方法的多模态快速磁共振重建卷积神经网络

曹怡, 杜宏伟 

(中国科学技术大学信息科学技术学院, 安徽合肥 230026)

通讯作者: 杜宏伟, E-mail: duhw@ustc.edu.cn




**摘要:** 从欠采样  $k$  空间矩阵中精确重建完整图像是加速磁共振成像 (MRI) 的一种可行方法。近年来, 许多基于深度学习的方法被用于加速 MRI 重建。在这些方法中, 跨域方法已被证明是有效的。然而, 现有的跨域重建算法将图像域和  $k$  空间网络顺序级联, 忽略了不同域之间的相互作用, 导致重建精度不足。为有效利用来自多个 MR 域和模态的相关信息, 本文提出了一个具有辅助模态的深度交互双域网络 (IDDNet) 以加速 MRI 重建。IDDNet 首先从图像域的低分辨率目标模态中提取浅层特征来获得视觉表征。在接下来的特征处理中, 本文设计了一种双分支并行交互网络架构, 同时从双域的相关信息中提取深度特征, 从而

避免了顺序连接时不同域间的冗余优先级。此外, 该模型利用辅助模态的附加信息来细化结构, 提高重建精度。在 MICCAI BraTS 2019 脑部和 fastMRI 膝关节数据集上, 采取不同采样模版和加速速率的大量实验表明, IDDNet 实现了优异的 MRI 重建性能。


**关键词:** 磁共振重建; 深度学习; 双域; 多模态

**引用格式:** JUSTC, 2024, 54(3): 0302

## 主动和被动吸烟对多发性硬化和视神经脊髓炎临床病程的影响

瞿凤玲, 周晴晴, 丰硕, 李瑞, 陶春蓉 , 胡伟 , 刘新峰 

(中国科学技术大学生命科学与医学部, 中国科学技术大学附属第一医院神经内科&卒中中心, 安徽合肥 230001)

通讯作者: 陶春蓉, E-mail: 601893613@qq.com; 胡伟, E-mail: andinghu@ustc.edu.cn; 刘新峰, E-mail: xfliu2@ustc.edu.cn

**摘要:** *目的:* 主动吸烟和被动吸烟是常见的环境危险因素, 但它们对多发性硬化 (MS) 和视神经脊髓炎谱系障碍 (NMOSD) 复发和残疾进展的影响尚无确切结论。多发性硬化和视神经脊髓炎是两种常见的中枢神经系统脱髓鞘疾病, 本研究旨在调查主动和被动吸烟对这两种疾病复发和残疾进展的影响。 *方法:* 这是一项回顾性队列研究, 患者来自四个中心。人口统计学和临床数据从临床数据库中提取, 而涉及日常生活中环境暴露、复发和残疾进展的数据通过电话随访访谈获得。Cox 比例风险回归模型用于评估复发的影响, 多因素线性回归模型用于评估残疾进展。使用 Kaplan-Meier 生存曲线估计首次发作后五年内患者的复发情况。 *结果:* 本研究共纳入 130 名 MS 患者和 318 名 NMOSD 患者, 女性分别占 60% 和 79.6%。有主动吸烟史的 MS 患者复发风险更高, 在控制协变量后, 这种关联变得临界显著 ( $aHR=1.52, 95\%CI=1.00, 2.31; p=0.052$ )。每天吸烟超过 10 支的患者和每天吸烟少于 10 支的患者之间复发风险没有统计学差异 ( $aHR=0.96, 95\%CI=0.63, 1.47; p=0.859$ )。然而, 与从未接触过被动吸烟的患者相比, 接触被动吸烟与 MS 复发风险降低相关 ( $aHR=0.75, 95\%CI=0.56, 1.00; p=0.044$ )。主动吸烟/被动吸烟与 NMOSD 复发风险之间没有关联, 但有吸烟史的患者扩展

残疾状态评分 EDSS ( $\alpha\beta=-0.20$ ,  $95\%CI=-0.38, -0.01$ ;  $p=0.036$ ) 和多发性硬化严重程度评分 MSSS ( $\alpha\beta=-0.23$ ,  $95\%CI=-0.44, -0.03$ ;  $p=0.028$ ) 的年度进展率较低。结论: 我们的研究表明, 主动吸烟会增加 MS 的复发风险, 并对患者残疾进展有负面影响, 应鼓励患者发病后戒烟。

**关键词:** 吸烟; 复发; 残疾; 多发性硬化症; 视神经脊髓炎谱系障碍

**引用格式:** JUSTC, 2024, 54(3): 0303

## 高透明度和高强度的纳米粘合水凝胶贴片用于组织粘附

罗清<sup>1,2</sup>, 潘钊<sup>2</sup>, 宋永红<sup>3</sup>, 黄婕妤<sup>1,2</sup>, 方辉<sup>4</sup>, 刘东全<sup>5</sup>✉, 董良<sup>2</sup>✉

(1. 浙江工业大学材料科学与工程学院, 浙江杭州 310014; 2. 中国科学院杭州医学研究院, 浙江省肿瘤医院, 浙江杭州 310018; 3. 合肥工业大学化学与化工学院, 安徽合肥 230009; 4. 安徽医科大学口腔医学院, 安徽医科大学附属口腔医院, 安徽省口腔疾病研究重点实验室, 安徽合肥 230032; 5. 安徽省第二人民医院普外科, 安徽合肥 230601)

**通讯作者:** ✉刘东全, E-mail: totoro91@foxmail.com; 董良, E-mail: dongliang@him.cas.cn

**摘要:** 本研究旨在设计和制备一种具有优异机械性能和生物相容性的双层结构壳聚糖水凝胶粘合贴片, 并借助纳米粘合策略评估其组织粘附性能。以物理交联构建坚韧的壳聚糖水凝胶作为背膜, 随后通过原位光交联制备粘合剂水凝胶层, 形成一体化的壳聚糖水凝胶粘合贴片。利用纳米胶水促进贴片与基底之间的纳米粘合。表面活化的二氧化硅纳米颗粒作为类似于纳米胶的界面连接器, 促进水凝胶与基底的结合, 以建立水凝胶贴片与生物组织之间的粘附关系。分析结果显示, 水凝胶贴片在体外对生物组织的粘合能量为  $282 \text{ J/m}^2$ , 爆破压力为  $450 \text{ mmHg}$  ( $1 \text{ mmHg}=0.133 \text{ kPa}$ )。该贴片具有  $4.3 \text{ MPa}$  的拉伸强度、 $65\%$  的断裂伸长率和  $3.82 \text{ kJ/m}^2$  的断裂韧性, 具有出色的机械性能。此外, 这种基于纳米粘合剂的壳聚糖水凝胶粘合贴片具有高透明度和优异的生物相容性, 有望在组织修复和药物输送等多个生物医学领域得到应用, 为临床外科手术的发展提供坚实的材料基础。

**关键词:** 水凝胶贴片; 纳米粘合; 壳聚糖; 纳米胶水; 双

层结构

**引用格式:** JUSTC, 2024, 54(3): 0304

## 再保险人违约风险下非对称信息的 Bowley 再保险

邹振烽✉, 夏子超

(中国科学技术大学管理学院统计与金融系, 安徽合肥 230026)

**通讯作者:** ✉邹振烽, E-mail: newzzf@mail.ustc.edu.cn

**摘要:** 信息不对称的 Bowley 再保险是指: 保险人和再保险人利用扭曲风险度量衡量风险, 但保险人的扭曲风险度量存在不对称信息。在前人研究的基础上, 我们研究了再保险人违约风险下信息不对称情形下的 Bowley 再保险问题。我们将此解决方案称为违约风险下的 Bowley 解决方案, 并在一般假设下提供了该解决方案的显式解。最后, 给出了一些数值例子来说明本文的主要结论。

**关键词:** Bowley 再保险; 非对称信息; 扭曲-偏差保费原则; 扭曲风险度量; 违约风险

**引用格式:** JUSTC, 2024, 54(3): 0305

## 纵向数据下精度矩阵的替代的修正 Cholesky 分解

芦飞✉, 曾宇婷

(浙江理工大学理学院, 浙江杭州 310018)

**通讯作者:** ✉芦飞, E-mail: lufeiby@163.com

**摘要:** 纵向数据下相关系数矩阵可能具有科学意义。然而, 在精度矩阵具有典型结构时, 很少有文献同时关注对模型误识别稳健的相关系数矩阵估计和对于数据中离群值的稳健性。本文中我们为纵向数据的精度矩阵提出了一种替代的修正 Cholesky 分解 (alternative modified Cholesky decomposition, AMCD), 这导致了关于新息方差模型误识别稳健的相关系数矩阵估计。我们建立了基于多元正态分布和 AMCD 的联合均值-协方差模型, 发展了拟 Fisher 得分算法, 证明了其极大似然估计的相合性和渐近正态性。进一步, 我们建立了基于多元 Laplace 分布和 AMCD 的双稳健联合建模方法, 为其极大似然估计发展了拟 Newton 算法。模拟研究和实际数据分析验证了所提 AMCD 方法的有效性。

**关键词:** Cholesky 分解; 精度矩阵; 相关系数矩阵; 多元 Laplace 分布; 稳健性

**引用格式:** JUSTC, 2024, 54(3): 0306