

## 中文概要

2023 年第 53 卷第 12 期

## 肿瘤内细菌调控肿瘤细胞可塑性研究进展与展望

钟儒天<sup>1</sup>, 余星辰<sup>1</sup>, 杨丰瑞<sup>1</sup>, 姚雪彪<sup>1,2</sup>, 刘行<sup>1,2</sup>✉

(1. 细胞动力学教育部重点实验室, 合肥微尺度物质科学国家研究中心, 安徽合肥 230026; 2. 中国科学技术大学细胞动力学与化学生物学安徽省重点实验室, 安徽合肥 230027)

✉通讯作者: 刘行, E-mail: xing1017@ustc.edu.cn

摘要: 病原微生物与宿主细胞的交流与互作机制是生物医学领域的重要科学问题。随着单细胞分析和多组学研究模式的拓展, 该领域迎来了新的科研突破。最新研究表明, 肿瘤内细菌通过与肿瘤细胞及肿瘤免疫细胞互作改变肿瘤的演进和可塑性。为此, 进一步解析肿瘤内细菌与宿主细胞之间的相互作用机制有望为靶向干预肿瘤发展与演进提供新的思路。本文综述了肿瘤内细菌与肿瘤细胞可塑性的研究进展, 并展望了未来在制定肿瘤的精准治疗和新的靶向策略方面的潜在启示。

关键词: 肿瘤; 微生物; 细菌; 病原微生物-宿主互作

引用格式: JUSTC, 2023, 53(12): 1201

## NFSI 参与的高效铜催化苄位碳氢键烷氧化反应

张铖, 汪普生✉

(中国科学技术大学化学系, 合肥微尺度物质科学国家研究中心, 安徽合肥 230026)

✉通讯作者: 汪普生, E-mail: pusher@ustc.edu.cn

摘要: 本文报道了一种铜催化苄位碳氢键烷氧化反应, 该反应在不需添加牺牲还原剂的条件下进行。机理研究揭示了从醋酸铜、N-氟代双苯磺酰胺和甲醇生成活性一价铜物种的新途径, 其中适当用量的铜催化剂能够平衡苄位碳氢键烷氧化反应和苄基醚产物过度氧化的反应速率, 从而获得最佳收率。

关键词: 碳氢活化; 氢原子转移; 烷氧化; 醇; 铜; 自由基

引用格式: JUSTC, 2023, 53(12): 1202

## 结构知识错误而非奖励敏感性不足解释了衰老过程中的元控制减弱

左肇煜<sup>1,2</sup>, 杨立状<sup>1,2,3</sup>✉, 李海<sup>1,2,3</sup>✉

(1. 中国科学院合肥物质科学研究院医学物理与技术安徽省重点实验室, 健康与医学技术研究所, 安徽合肥 230031; 2. 中国科学技术大学, 安徽合肥 230026; 3. 中国科学院合肥肿瘤医院, 安徽合肥 230031)

✉通讯作者: 杨立状, E-mail: lzyang@cmpt.ac.cn; 李海, E-mail: hli@cmpt.ac.cn

摘要: 人们根据成本-效益权衡原则灵活地调整无模型(习惯性)和基于模型(目标导向)策略的权重, 这种能力被称为元控制。最近的研究表明: 老年人的元控制灵活性减弱。然而, 老年人的元控制缺陷究竟源于认知因素还是动机因素仍然存在争议。本研究结合瞳孔测量记录和具有不同任务结构及奖励水平的序列决策任务对这一问题进行了研究。研究结果复现了之前的研究发现, 即老年人采用了更少的基于模型策略, 并且在奖励水平改变时元控制灵活性不足。然而, 瞳孔分析表明了老年人对奖励水平的敏感性。口头报告分析揭示了老年人的任务结构知识存在个体差异, 结构知识较好的亚组与年轻人表现出相似的模式。计算仿真证明结构知识不准确会妨碍元控制。以上结果表明, 老年人元控制的灵活性不足并非由于缺乏动机, 而是结构知识不准确。

关键词: 决策; 元控制; 强化学习; 衰老

引用格式: JUSTC, 2023, 53(12): 1203

## 机器学习饮食质量评分与心血管疾病风险

杨灿<sup>1</sup>, 李琦<sup>1</sup>, 刘炎<sup>1</sup>, 张玲<sup>1</sup>, 高健<sup>1</sup>, 徐旭<sup>2</sup>, 袁敏<sup>1,3</sup>✉

(1. 安徽医科大学健康数据科学系, 安徽合肥 230032; 2. 美国 Genmab 公司临床药理学与定量科学, 新泽西州普林斯顿 08540; 3. 出生人口健康教育部重点实验室, 安徽合肥 230032)

✉通讯作者: 袁敏, E-mail: myuan@ustc.edu.cn

摘要: 目的: 目前营养学领域已建立了多种饮食评分体系用于衡量整体饮食质量, 并用于心血管疾病等非传染性慢性疾病的预防和管理。基于现代机器学习技术构建的饮食评分可能包含独立的信息, 若结合临床经验构建的饮食评分有望提供更好的膳食建议。方法: 本文提出了一种新颖的基于机器学习方法的饮食质量评分(DQS), 并研究DQS与健康饮食指数-2015(HEI2015)、地中海饮食评分(MED)、替代健康饮食指数-2010(AHEI)结合后与心血管疾病风险的关联。研究数据来源于美国国家健康与营养调查(NHANES)的2011-2012年至2017-2018年周期。研究人群为年龄在20岁以上的成年人, 通过参与者自我报告收集食物摄入情况以及相关协变量信息。我们采用弹性网络惩罚回归模型选择重要的食物特征, 并使用广义线性回归模型在控制年龄、性别和其他相关协变量后估计相对风险OR和95%置信区间。结果: 共计16756名参与者纳入分析。在调整其他常见饮食评分后, DQS与冠状动脉疾病(CAD)风险显著相关。DQS与HEI2015、MED、AHEI和得舒饮食(DASH)得分结合的OR都在0.900左右,  $p$ 值小于0.05。在包括所有其他评分的全模型中, DQS的OR值为0.905(95% CI, 0.828-0.989,  $p=0.028<0.05$ )。结论: 基于NHANES连续4个周期的数据, 较高的DQS与较低的CAD风险相关。DQS捕获了独立于现有饮食评分的独特预测信息, 因此可以作为补充评分系统, 进一步改善CAD患者的饮食推荐。

关键词：饮食质量评分；心血管疾病；美国国家营养与健康调查 (NHANES)；机器学习方法

引用格式：JUSTC, 2023, 53(12): 1204

### 基于机器学习的 2 型糖尿病与骨代谢的关联性研究

胡嘉桐<sup>1,2,3</sup>, 刘明晴<sup>1,2,3</sup>, 李红旗<sup>4</sup>, 岳佳音<sup>2</sup>, 王炜<sup>2</sup>✉, 刘际<sup>1,2,3,5</sup>✉

(1. 中国科学技术大学信息科学技术学院, 类脑智能技术及应用国家工程实验室, 安徽合肥 230027; 2. 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内分泌科, 安徽合肥 230001; 3. 合肥综合性国家科学中心人工智能研究院, 安徽合肥 230088; 4. 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老年医学科, 安徽合肥 230001; 5. 中国科学技术大学生命科学学院, 中国科学院脑功能与脑疾病重点实验室, 安徽合肥 230027; )

✉通讯作者：王炜, E-mail: hfww2001@ustc.edu.cn; 刘际, E-mail: lj1257@ustc.edu.cn

摘要：2 型糖尿病常伴有严重的并发症, 包括骨代谢性疾病、肝病、肾病等, 受病程、性别、年龄和个体差异的影响, 没有统一的治疗模式。因此, 深入分析临床数据、寻找 2 型糖尿病并发症数据的相关性, 对 2 型糖尿病及其并发症的治疗具有重要的指导意义。本文以安徽省 2 型糖尿病患者的临床数据为基础, 建立多元线性回归模型。我们的研究表明, 影响 2 型糖尿病骨并发症的主要因素包括体型指数、肌酐、尿酸、甘油三酯和血压。有趣的是, 2 型糖尿病患者的腰椎骨密度增加, 这表明 2 型糖尿病患者存在腰椎骨质增生的风险。

关键词：2 型糖尿病；机器学习；多元线性回归模型；骨代谢

引用格式：JUSTC, 2023, 53(12): 1205

### 分子自组装薄膜调控 MoS<sub>2</sub>/TiO<sub>2</sub> 的光致发光性质的研究

查何辰宇, 邢月, 项苗苗, 邵翔✉

(中国科学技术大学化学物理系, 安徽合肥 230026)

✉通讯作者：邵翔, E-mail: shaox@ustc.edu.cn

摘要：自组装薄膜是一种修饰材料表面、使之功能化的有效方法。本文初步探讨了 10,12-二十五二炔酸(PCDA)自组装薄膜对生长在金红石型二氧化钛(r-TiO<sub>2</sub>)(110)单晶表面的单层二硫化钼(MoS<sub>2</sub>)光学性能的调节作用。我们通过原子力显微镜(AFM)表征发现, PCDA 分子在 MoS<sub>2</sub>/TiO<sub>2</sub> 表面自组装成与在纯 MoS<sub>2</sub> 表面相同的片状结构, 并在紫外光(UV)照射下进一步聚合成共轭的导电聚二乙炔(PDA)链。在光致发光(PL)测量中观察到, PCDA 组装薄膜的添加及其进一步光致聚合, 会导致 MoS<sub>2</sub> 中的负 A 激子(A<sup>-</sup>)发光逐步增加, 而总发光强度逐渐下降, 表明 PCDA 的组装及其聚合产物相对于 MoS<sub>2</sub> 具有不同的电子给予性。这些结果加深了我们对多组分系统中界面相互

作用的理解, 同时也证明了自组装薄膜是调整二维材料复合体系的电子与光学特性的一种有效策略。

关键词：10,12-二十五二炔酸；MoS<sub>2</sub>/TiO<sub>2</sub>；自组装；光致聚合；光致发光

引用格式：JUSTC, 2023, 53(12): 1206

### ABC 输出转运体蛋白质分子的门控机制：计算模拟研究

王子, 廖结楼✉

(中国科学技术大学化学物理系, 安徽合肥 230026)

✉通讯作者：廖结楼, E-mail: liaojl@ustc.edu.cn

摘要：三磷酸腺苷结合盒式(ATP-binding cassette, ABC)输出转运体是一类典型的蛋白质分子机器, 这类分子机器通过门控运动进行“向外打开”(outward-facing, OF)和“向内打开”(inward-facing, IF)构象态之间转换, 从而把底物转输出生物膜外。尽管结构和功能的研究已取得重大进展, 但对 ABC 输出转运体构象门控的分子机制还没有完全理解。由于全原子分子动力学存在长时间尺度问题, 因此对 ABC 蛋白质分子构象变化不能进行完全描述。本文应用粗粒化分子动力学(CG-MD)结合改善的抽样方法, 对细菌 ABC 输出转运体 MsbA 进行计算模拟研究。本文计算得到的平均力势(potential of mean force, PMF)表明, 从 OF 构象态到 IF 构象态之间的转变需要经过一个“阻塞态”(occluded state, OC), 即 MsbA 的内门和外门都是关闭的状态。这种阻塞状态对 ABC 输出功能的方向单一性具有重要意义。我们的 CG-MD 计算模拟结果显示, 随着 MsbA 的核苷酸结合域(nucleotide binding domain, NBD)的分离, 外门的关闭和内门的打开是采用高度协作的方式。基于本文的计算模拟结果, 我们提出了一个与目前文献中发表的有很大不同的机械力学模型, 揭示了 ABC 输出转运体通过构象门控运动运输底物的分子机制。

关键词：三磷酸腺苷结合盒式输出转运体；平均力势；粗粒化分子动力学；机械力学模型

引用格式：JUSTC, 2023, 53(12): 1207

### 代数几何码的 Galois 对偶码的 Weil 微分表示

李家齐<sup>1</sup>, 马立明<sup>2</sup>✉

(1. 中国科学技术大学数学科学学院, 安徽合肥 230026; 2. 中国科学技术大学数学科学学院吴文俊数学重点实验室, 安徽合肥 230026)

✉通讯作者：马立明, E-mail: lmma20@ustc.edu.cn

摘要：Galois 对偶码是 Euclid 对偶码和 Hermite 对偶码的推广。我们证明了函数域  $F/\mathbb{F}_{p^e}$  上代数几何码  $C_{L,F}(D,G)$  的  $h$ -Galois 对偶码是  $F'/\mathbb{F}_{p^e}$  上的代数几何码  $C_{Q,F'}(\phi_h(D), \phi_h(G))$ , 其中,  $F'/\mathbb{F}_{p^e}$  是一个与  $F/\mathbb{F}_{p^e}$  有关的函数域,  $\phi_h$  是从  $F$  到  $F'$  的同构映射, 并且对任意  $a \in \mathbb{F}_{p^e}$  满足  $\phi_h(a) = a^{p^e-h}$ 。作为上述结果的应用, 我们构造了一类  $h$ -Galois LCD MDS 码。

关键词：代数几何码；Galois 对偶码；Galois 线性补对偶码；MDS 码

引用格式：JUSTC, 2023, 53(12): 1208