

☰ 首頁 / 認識陽明交大 / 關於我們 / 新聞專區 / 焦點新聞

焦點新聞

</>
XML

{...}
JSON

🔄 EN

科學 發布日期：114-11-24

與諾貝爾化學獎得主合作



工程與計算生物實驗室團隊成員合照

文、圖/公關組

與諾貝爾化學獎得主合作 羅惟正開發高速蛋白質結構比對演算法

準確預測及分析比較蛋白質結構，能幫助科學家理解藥物與治療標靶之間的相互作用，加速藥物研發。但這項工作一直是科學界難題。如今該難題在全新演算法幫助下有了重大突破。

生物科技學系羅惟正副教授與諾貝爾化學獎得主瓦謝爾(Arieh Warshel)合作，開發出高效能蛋白質結構比對搜尋演算法SARST2。該演算法可在龐大的數億筆資料庫中迅速比較蛋白質結構，加速新藥研發。

羅惟正解釋，蛋白質的功能取決於其立體結構，因此如何從胺基酸序列精準預測蛋白質結構，一直是科學界核心問題。隨著Google DeepMind 2020年推出結構

預測系統AlphaFold2後，該問題有了強大解答工具，卻也帶來全新挑戰：蛋白質結構資料量因AlphaFold團隊投入大規模預測後暴增千倍，使結構比對分析面臨前所未有的大數據壓力，全球科研亟需高效能的新世代演算法。

在這波浪潮中，羅惟正研究團隊整合AI與結構平運算技術開發的SARST2演算法，可在數億筆資料中精準比對蛋白質結構，速度較既有演算法快上數百至數萬倍，且記憶體與磁碟使用量皆大幅降低，與國際最新演算法相比毫不遜色。

諾貝爾獎得主親自參與 國際合作締造佳話

諾貝爾化學獎得主瓦謝爾是開創「計算機酵素學」(Computational Enzymology)的大師，也是工程生物科學學院前院長黃鎮剛的授業恩師。羅惟正受黃鎮剛教授啟發了對計算生物學的興趣，因此一直尊稱瓦謝爾為「師爺」。

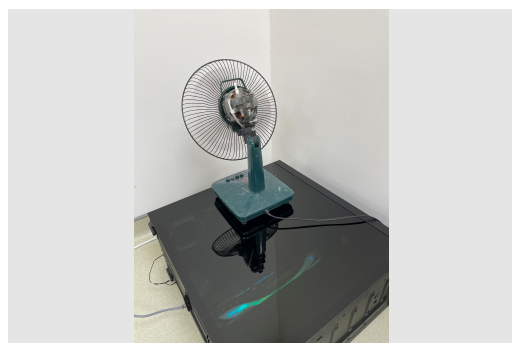
2022年，羅惟正跟師爺分享了演算法概念且獲其肯定，從此研究團隊與其展開每月線上會議。這不僅對研究有莫大助益，羅惟正說，他一直期盼為社會培育優秀的領導人才，而這樣讓學生直接向諾貝爾獎大師學習，能大幅提升他們的國際視野與學術敏感度。

資源有限創國際級成果 獲產業界支持

羅惟正的團隊研究主題高度仰賴數理及程式設計能力，他直言長久來招生難度較高、人力有限，爭取資源的精力也受限，卻又樂觀笑稱：「我們就是群穿草鞋的，用放在地上的拼裝個人電腦和連外殼都壞掉的本土牌散熱電扇，跟擁有大型伺服器與高級機房的國際團隊競爭演算法開發。」

這項研究刊登在《Nature Communications》，展現臺灣團隊在全球生物資訊領域的實力及韌性。成果也吸引產業界關注，其中宏碁集團子公司安圖斯科技(Altos Computing Inc.)樂於投入實質支持，提供高階 Altos AI 伺服器算力，協助團隊建置穩定高效的遠端運算環境。期盼產學互助、整合實力，將AI應用於量子生物資訊計算、生醫大數據分析及蛋白質藥物研發等前瞻主題，提升臺灣在資訊、生技與醫學領域的國際競爭力。

相關圖片：



圖為羅惟正(中)與2013年諾貝爾化學獎得主Arieh Warshel教授(左)第一次面對面討論

研究團隊使用個人電腦等級的伺服器進行運算

延伸閱讀：



114-07-08

AI解密細胞核毛線球宇宙

[回上一頁 >](#)

展開/收合

NYCU 國立陽明交通大學

📍 校址：300093 新竹市東區大學路1001號 [↗](#)

☎ 電話：+886-3-571-2121

陽明校區

📍 地址：112304 臺北市北投區立農街2段155號 [↗](#)

☎ 電話：+886-2-2826-7000

交大校區

📍 地址：300093 新竹市東區大學路1001號 [↗](#)

☎ 電話：+886-3-571-2121

Copyright © 2023 National Yang Ming Chiao Tung University All rights reserved.



隱私權及安全政策