

利用人工智能 分析蛋白質結構

科學講堂

人工智能是近日的一個熱話題，不僅已被應用到許多不同的領域，它的能耐更能與人類看齊，面對很多的工作時，人工智能的表現已能達到人類的水平，甚至還能幫助我們處理過去難於應付的問題，其中理解蛋白質的結構，正是這樣的一個例子。今次就跟大家探討一下這個課題。

酵素如積木 聚化學分子

蛋白質是我們身體中一種十分重要的物質，除了是我們肌肉的主要成分，還在身體中擔當許多重要的工作，例如調節各種身體內部運作的荷爾蒙，幫助我們消化食品、加速各種身體生化作用的酵素，都是蛋白質。理解這些蛋白質的形狀十分重要，比如說酵素好像積木一樣，能夠將形狀與它相符的幾個化學分子聚在一起，以加速它們之間的化學作用。正因如此，理解不同蛋白質的形狀，亦是明白我們身體是如何運作的很重要的一步。

由上千個氨基酸組成

現在我們已知道，蛋白質是由不同的氨基酸串連在一起組成，但是如何從一串串、不同排列的氨基酸中，推論出相對應的蛋白質的形狀，卻一直是科學家面對的大難題。一些蛋白質往往由上千個氨基酸組成，而不同的氨基酸之間又有不同的化學反應，會有不同程度的吸引或排斥；所以要仔細分析，這一連串的氨基酸如何因為相互之間的吸引或

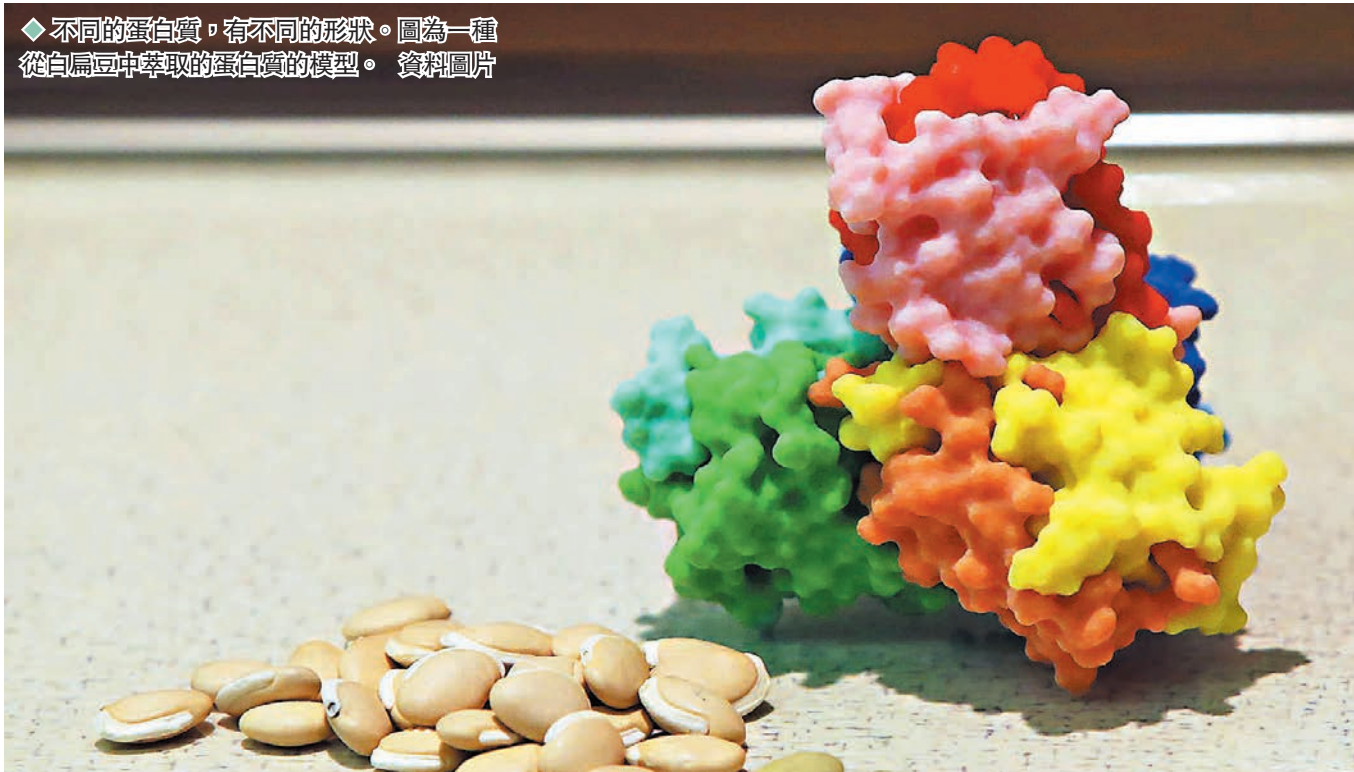
排斥而造成不同形狀的蛋白質，實在不容易。

人工智能擅長處理大量數據，從中找出我們不一定留意到的規律。這些特點令人工智能十分適合挑戰蛋白質結構這個難題。AlphaFold 及 RoseTTAFold 就是近年十分成功的利用人工智能推斷蛋白質形狀的平台。這兩個平台利用模仿人腦的神經網絡，將電腦資源連接起來以進行運算。

用已知結構蛋白質來推論

不過，我們也不用把人工智能太神化，因為人工智能也不是憑空就能懂得分析蛋白質結構的，它們還需利用已知的蛋白質結構來進行推論。這些平台的開發人員利用數以十萬計我們已經知道的蛋白質形狀來進行訓練。當訓練以後，這些平台面對新的蛋白質的時候，背後的人工智能就會參看新蛋白質的氨基酸排序，再從已經知道形狀的蛋白質之中，找出擁有相類排序的蛋白質例子。

◆不同的蛋白質，有不同的形狀。圖為一種從白扁豆中萃取的蛋白質的模型。資料圖片



相類排序造成相類形狀

基於「相類的氨基酸排序也應該會造成相類的形狀」的原理，這些我們已經知道形狀的蛋白質例子，就可以用來推斷新蛋白質的結構。當然，其他相關蛋白質的形狀也能夠幫助人工智能作出推論。

這些平台十分成功，至今已預測了超過一億種蛋白質的形狀，大概是所有我們知道的蛋白質的一半。這當中不只涵蓋了

大部分人體會製造的蛋白質，還包括了其他 20 種我們經常研究的物種（例如老鼠、大腸桿菌）。這些結果大大地加速了科學家的研究進度。

人工智能亦有它們的不足之處，例如在訓練時沒有充足數據的部分，人工智能自然也不能夠作出太可靠的推論，比如現在的人工智能平台就不太能夠處理突變的蛋

白質。這些平台也主力研究蛋白質在隔離狀態下的形狀，但是當有其他生化分子在旁的時候，這些蛋白質會有怎樣的形狀改變？這就需要更多的研究了。

在人工智能的幫助下，許多相關的生物研究都隨之得到迅速的發展，更有不少科學家在開發新的研究方向。希望在不遠的未來能夠看到更多這些方面的突破。

◆杜子航 教育工作者

早年學習理工科目，一直致力推動科學教育與科普工作，近年開始關注電腦發展對社會的影響。

根的平方和

奧數揭秘

這次談的是一道含絕對值的方程。

問題：求方程 $|x^2 - x + \frac{1}{2004}| = \frac{1}{2004}$ 所有根的平方和。

答案：絕對值內的算式，可以是 $\pm \frac{1}{2004}$ 。

先考慮 $x^2 - x + \frac{1}{2004} = \frac{1}{2004}$ ，消去 $\frac{1}{2004}$ 後因式分解，得 $x(x-1) = 0$ ，從而 $x = 0$ 或 1 。

然後是 $x^2 - x + \frac{1}{2004} = -\frac{1}{2004}$ ，把 x 移去右方，其餘移去左方，得 $x^2 + \frac{1}{1002} = x$ 。之後兩邊取平方，得

$$x^4 + \frac{1}{501}x^2 + \frac{1}{1002^2} = x^2$$

$$x^4 - \frac{500}{501}x^2 + \frac{1}{1002^2} = 0$$

這是一道以 x^2 為未知數的一元二次方程，根之和是 $\frac{500}{501}$ ，亦是原方程其中兩個根的平方和。

因此原方程之根的平方和為 $\frac{500}{501} + 0^2 + 1^2 = \frac{1001}{501}$ 。

題解中，開始時都是先消去絕對值的符號，把絕對值內的算式分為正負兩個情況。正數值的情況易知，到了負數，就是一道一元二次方程。這個要解出來也挺麻煩的，既要求平方，還有個很複雜的根式要計算。這裏有個巧妙地繞過根式計算的方法，就是先找以 x^2 為未知數的一元二次方程，再求出該方程的根之和。

其實計算根的平方和沒什麼特定的方法，要是滿足於解出方程，又不介意化簡一大堆根式，夠耐性真的會做得到。當然，要是想突破一下自己，又的確需要要求自己多做一點點。

課程內不久也會問一些找新方程的問題，比如說 $x^2 - 2x - 5 = 0$ 的兩根為 α 和 β ，試找出以 α^2 及 β^2 為根的一元二次方程。這個平常都是找根之和與積去做，其實也可以像這次的題解般，移項成 $x^2 - 5 = 2x$ ，再取平方，那樣得 $x^4 -$

$10x^2 + 25 = 4x^2$ ，移項去左方後，把 x^2 設為 y ，得知所要求的方程為 $y^2 - 14y + 25 = 0$ 。類似的問題在課程內是常見的，這次的題解只是其中一步，要自己懂得把課程內的技巧融入解題過程中，才有新發現。

在奧數的學習過程之中，會發現課內的問題有時只是奧數題裏其中一個小的步驟，或只是一個嘗試的方向。到知道解答方法，又可能會發現，奧數題的解決方式，也會為課內的題目提供一個新的想法。

在學數學的過程中，見到新的問題，知道解決的方式後，盡量把這些新想法跟舊有的連繫起來，反覆應用，就是一個好的鍛煉方法。當新舊思想連結多了，看到舊問題時思路就豐富了，也容易引起各樣的聯想和創意，平常也能在聯想中多了溫習新想法的時刻。

◆張志基

親子清潔龍鼓灘 創意短片教環保

綠得開心@校園

現今的世界正面臨嚴峻的考驗，能源危機、空氣污染、海洋污染、極冰融化，各種危機接踵而至，故擁有環保意識，體驗綠色生活，節省能源，愛護大自然，就成了人類的當務之急。

身為小學生，將會是未來社會的主角，同樣背負着艱巨的環保使命。為了增進同學們的環保知識和意識，我校舉辦了一系列環保活動，希望能在各層面為同學打開認識世界的窗口。

為讓同學們了解如何在日常生活中減廢，我安排同學們觀賞有關環保主題的話劇，讓同學們了解生物多樣性，並學習如何保護環境。活動當中加入角色扮演及互動元素，寓教於樂，讓同學們在笑聲中領略低碳生活帶來的樂趣。

本年度，我校以海洋保育為重點環保教育計劃，為令同學了解香港的海洋生態及親身體驗海洋環保，同學與家長一同參與清潔龍鼓灘活動，一同為保護海洋出一分力，還輕鬆享受親子之樂。海天一色的美麗風景，映襯着一對對溫馨的背影，真是一個有意義的周末呢！

在每學年一連串環保活動之後，漫長的暑假正是小朋友們實踐綠色生活的絕佳時機。我校已連續四年舉辦了「『綠綠』無窮」校內環保親子短片創意大賽，同學們紛紛用錄製短片的方式，將他們的環保經驗分享給大家，有的會將一家人旅行中的環保體驗呈現給大家，新奇有趣；有的會分享獨特的植物種植經驗，令人大開眼界；有的會給大家講解海洋生物現狀，讓大家感同身受；有的會詮釋生活中的環保小點子，生動而又令人讚歎。更有一家大小齊齊出鏡，每位家庭成員都化身為演員，將作品演繹得精彩絕倫，同時也給師生們上了一節又一節生動的環保課。學校會將參賽作品在全校播出，然後讓全體師生投票，選出及嘉獎表現優秀的同學，並將作品上載至學校網頁，將環保信息傳播給社區上更多的人。

我創辦了學校電視台中的「綠色頻道」專欄，除了將「『綠綠』無窮」校內環保親子短片創意大賽作品收錄於其中，還創辦了「環保知多D」短片分享欄目，包涵了老師們的環保經驗分享、講述動植物知識、環保活動精彩回顧等，內容豐富，深受大家喜愛。



◆同學與家長一同參與清潔龍鼓灘活動，為海洋環保出一分力。作者供圖



◆「『綠綠』無窮」校內環保親子短片創意大賽鼓勵同學們將日常環保經驗分享給大家。作者供圖

學校將會持續這份環保理念，讓同學在接下來的日子裏，經歷更多、更獨特的環保體驗，實踐環保低碳生活，從自己做起，從身邊做起，珍惜資源，愛護動植物，過綠色生活。

◆順德聯誼總會何日東小學

(港燈「綠得開心計劃」「綠得開心學校」之一，2020/21年獲選為「最傑出綠得開心學校—卓越獎」。)

港燈綠得開心計劃，致力透過多元化活動，協助年輕一代及公眾人士培養良好的用電習慣、多認識可再生能源和實踐低碳生活，目前已超過五百間全港中小學校加入「綠得開心」學校網絡。如欲加入一同學習和推動環保，歡迎致電3143 3727或登入www.hkelectric.com/happygreencampaign。

