

第九屆海峽兩岸生物啟發的理論科學問題研討會

2014 年 6 月 26-28 日
台灣中壢 中原大學國際會議廳

學術報告紀要

(繳交科技部報告之學術報告部份)

陳中庸

2014 年 7 月 15 日

捌、研討會發言紀要（含議程）

大陸學者由郝柏林院士與歐陽鐘燦院士為主，於6月25日來台，均下榻中壢古華飯店。第九屆「海峽兩岸生物啟發的理論科學問題研討會」(BITS9)于6月26日開始假中原大學國際會議廳舉辦，研討會計3天，6月26日~28日；並於6月29日與30日兩天安排參訪，分別是參訪中央大學系統生物與生物資訊研究所與中央研究院物理所。

第九屆「海峽兩岸生物啟發的理論科學問題研討會」開場時，由中原大學張光正校長先致詞。校長首先提到「海峽兩岸生物啟發的理論科學問題研討會」源起於1998年，由郝柏林與李弘謙發起，台灣國科會理論科學中心物理組與中國科學院北京理論物理所共同贊助。第一屆在中央大學舉行，之後每兩年舉辦一次，2000年北京理論物理所，2002年花蓮東華大學，2004年廈門大學，2006年台中東海大學，2008年長沙湖南師大，2010年台南成功大學，2012年宜昌三峽大學。第九屆「海峽兩岸生物啟發的理論科學問題研討會」是中原大學主辦與中央大學協辦，為台灣學術界重要的大型學術交流活動，更是兩岸學者的難得的交流機會。「海峽兩岸生物啟發的理論科學問題研討會」是將理論物理、生物理論計算、生物分子模擬等學術領域結合的一場交流研討會。



圖一：中原大學張光正校長

緊接著是中原大學理學院黃敏章院長致詞，黃敏章院長對外賓介紹中原大學理學院的各個系所，包括系所特色、研究方向等。黃敏章院長以10分鐘的時間簡要的張顯中原大學理學院應用數學系、化學系、物理系、心理系與生物科技系等的研究概要。



圖二：中原大學理學院黃敏章院長

由於「海峽兩岸生物啟發的理論科學問題研討會」是由郝柏林院士與李弘謙教授共同發起，所以郝柏林院士與李弘謙教授分別發表簡短的感言。



圖三：郝柏林院士



圖四：李弘謙教授

第一場會議(論文摘要請參見手冊 S1-1~S1-3)的主持人是郝柏林院士，與談人有歐陽鐘燦院士、雷紅星教授、王存新教授、史華林教授。第一位上場的是中央研究院生物醫學所的黃太煌教授(參見附件圖五)，他的講題是”Structural Basis of SUMO-Mediated Signal Transduction Pathway”，黃太煌教授 SUMO peptide 的特殊序列組合與結合的關係。而 SUMO1 結合於 $^{732}\text{E-I-I-V-L-S-D-S-D}^{740}$ ，且 Daxx SIM 磷酸化會調合 SUMO 的表現。第二位上場的是中國科學院物理研究所的王鵬業教授(參見附件圖六)，他的講題是”Transplatin enhances effect of cisplatin on both single DNA molecules and live tumor cells”。王鵬業教授主要提到順鉑與反鉑的機制，並使用順鉑與反鉑一起的效能，且順鉑與反鉑一起時與 DNA 會產生聚合。第三位上場的是中興大學的周三和教授(參見附件圖七)，他的講題是”How Nature Uses Similar Biomolecular Structural Platforms to Perform Different Functions for Bacterial Pathogenicity”，周三和教授研究 cAMP, cGMP, c-di-GMP, c-di-AMP 與 cGMP 形成循環，此循環是 PilZ platform, CRP platform 與 c-di-nucleotide platform 有關。



圖五：黃太煌教授

圖六：王鵬業教授

圖七：周三和謙教授

6月26日上午的第二場會議(論文摘要請參見手冊 S2-1~S2-5)的主持人是黃太煌教授，與談人分兩部份，前3位講員的與談人有王鵬業教授、韋廣紅教授、周昕教授、方海平教授，後2位講員的與談人有鄭偉謀教授、史華林教授、王延頌教授、黎明教授。郝柏林院士是這場次的第一位講員，他的講題是”細菌親緣和分類研究後來居上”。郝柏林院士提及 CVTree 的細菌親緣和分類研究可採用細菌全基因體序列來分析，會比之前用 16srRNA 的分類法還準。第二位講員是華中科技大學的肖奕教授，他的講題是”Study of folding of Nascent Peptide Chains”。肖奕教授的研究提及蛋白質摺疊的時間與能階，肖奕教授利用空間，共轉譯與特定序列來解決 Levinthal's paradox。第三位講員是中原大學講座李弘謙教授，他的講題是”GSCMap – A Gene-Set-based Connectivity Map for characterizing bioactive compounds in terms of biological functional groups”。李弘謙教授提到使用 local CMAP 與 GSCMap 來作基因分析，CMAP/IGA 可依細胞形態作藥物分類，然後 GSLHC 來確認藥物關聯性。第四位講員是北京工業大學生命科學與生物工程院的王存新教授，他的講題是”Study on interaction mechanism among persistent organic pollutants and proteins using molecular modeling approaches”。王存新教授發現空氣污染中的 4,4'-DDE 與 CB-153 會與 Androgen receptor 結合而影響生理，王存新教授研究許多有機物污染與蛋白質的關聯。第五位講員是中央大學的黎壁賢教授，他的講題是”Dynamics and Waves in a cell lineage model”，黎壁賢教授研究主要以數學模型推導細胞現象，包括 Single Progenitor Cell in epithelial cell model、Autoregulated Single Progenitor Cell model、Cell lineages model with proliferation, migration, differentiation & de-differentiation、Pure growth model、Growth & differentiation (3 states) model 等。



圖八：郝柏林院士



圖九：肖奕教授



圖十：李弘謙教授



圖十一：王存新教授



圖十二：黎壁賢教授

6月26日下午第一場會議(論文摘要請參見手冊 S3-1~S3-5)的主持人是歐陽鐘燦教授，與談人分兩部份，前3位講員的與談人有左光宏教授、肖奕教授、舒咬根教授、周昕教授，後2位講員的與談人有黎明教授、張曉軼教授、陳慰祖教授、王存新教授。交通大學張家靖教授是第一位講員，他的講題是”Converting genetic materials to conducting nanowire”，張家靖教授提到 Ni ion 在 Ni-DNA 有低 Ni^{2+} 與高 Ni^{3+} 的氧化態而可以電壓與極性作序列交換，同時可利用這一特性產生程式型的多階記憶系統。第二位講員是交通大學的楊進木教授，他的講題是”Structure-based polypharmacology for drug discovery and optimization”。楊進木教授開發結構為主的”structure-based polypharmacology”的策略來開發新的抗生素與抗癌藥物，而這些藥物可在一代謝路進中作多目標的攻擊來增加治療效果與減少抗藥性。第三位講員是中國科學院理論物理研究所的鄭偉謀教授，他的講題是”宏基因組分析的自組織算法”。鄭偉謀教授提到新一代定序成本大為降低，推動了全基因體研究。但全基因體數據的讀出序列太短而存在問題。鄭偉謀教授探討自組織算法來註解原核生物之全基因體序列。第四位講員是東海大學的施奇廷教授，他的講題是”Toward the Fruitfly Connectome: Structural Analysis of the Brain Network”，施奇廷教授研究果蠅的大腦各細部的連結分析，來了解大腦如何結合各部而達到目的。施奇廷教授研究用精彩的動畫吸引大家的注意力。第五位講員是中科院北京基因組所的雷紅星教授，他的講題是”Hidden risk genes with high-order intragenic epistasis in Alzheimer’s disease”。雷紅星教授利用各種基因體的資料來分析阿茲罕默症並期望利用此多基因關聯分析來解決了解阿茲罕默症的機制。



圖十三：張家靖教授



圖十四：楊進木教授



圖十五：鄭偉謀教授



圖十六：施奇廷教授



圖十七：雷紅星教授

6月26日下午最後一場會議(論文摘要請參見手冊 S4-1~S4-5)的主持人是周三和教授，與談人分兩部份，前3位講員的與談人有李春華教授、左光宏教授、韋廣紅教授、李方廷教授，後2位講員的與談人有劉澤先教授、戚繼教授、王延頌教授、陳雅毛女士。第一位講員是中國科學院上海應用物理研究所的方海平教授，他的講題是”Orientation-dependent free diffusion and directional transportation of asymmetrical molecules at room temperature”，方海平教授研究惰性氣體聚集與生理的關係，方教授計算惰性氣體聚集的方式與效能來增加實用性。第二位講員是成功大學的張南山教授，他的講題是”Two faces of WWOX: tumor suppressor or promoter?”，張南山教授發現腫瘤抑制信號”WWOX”，並探討此腫瘤抑制信號如何結合而控制細胞移動。第三位講員是中央研究院物理研究所的胡進錕教授，他的講題是”Some recent developments in folding and aggregation of proteins”，胡進錕教授探討並認為”Pungent-cold exterior-relieving formulas”是在TCM cold prescriptions的主要法則。第四位講員是中央大學的王孫崇教授，他的講題是”A Predominance of Pungent-cold Exterior-relieving Traditional Chinese Medicine Formulas for the Common Cold”，王孫崇教授計算傳統中藥對流感交互影響，同時利用此一公式找到兩種中藥對流感有效。第五位講員是北京工業大學生命科學與生物工程學院的張小軼教授，她的講題是”研究野生型和耐藥突變型HIV整合酶的双效抑制劑的作用机理”。張小軼教授用分子模擬方法，揭示了双效抑制劑的作用机理。研究發現，該抑制劑能顯著降低野生型及突變型的活性，研究還發現，胺基酸62-67，72，92，115-121，139-141，147，148，以及胺基酸152-155對抑制劑的結合有關，對新型双效抑制劑研發提供理論基礎。



圖十八：方海平教授



圖十九：張南山教授



圖二十：胡進錕教授



圖二十一：王孫崇教授



圖二十二：張小軼教授

晚宴設在古華飯店續彩西餐廳，同時也慶祝郝柏林院士八十大壽。

6 月 27 日上午的第一場會議(論文摘要請參見手冊 S5-1~S5-4)的主持人是王鵬業教授，與談人有郝柏林院士、歐陽鐘燦院士、周昕教授、方海平教授。華中科技大學的薛宇教授是這場次的第一位講員，他的講題是” Bioinformatic analyses of the ubiquitin-conjugation system” ，薛宇教授利用 GPS-PLUB 來預測 E3 ubiquitin ligase 的專一性位置。第二位講員是中國科學院理論物理研究所的史華林教授，他的講題是” The effect of sequence and secondary structure of sRNA on repressing the translation of target mRNA” ，史華林教授計算一些因子對 sRNA 抑制 mRNA 的自由能。第三位講員是成功大學的張文綺教授，她的講題是” Identification of gene regulation mechanisms by using bioinformatics methods and high-throughput data in plants” ，張文綺教授利用基因表達晶片來分析阿拉伯芥苗的轉錄因子與基因關係。第四位講員是中央大學的陳志浩教授，他的講題是” Two approaches to improving transcriptome analysis” ，陳志浩教授利用 HTA-OAPS 這兩種方式使轉譯體分析之精確度達 86%。



圖二十三: 薛宇教授



圖二十四: 史華林教授



圖二十五: 張文綺教授



圖二十六: 陳志浩教授

6 月 27 日上午的第二場會議(論文摘要請參見手冊 S6-1~S6-5)的主持人是雷紅星教授，與談人分兩部份，前 3 位講員的與談人有歐陽鐘燦院士、雷紅星教授、王存新教授、李春華教授，後 2 位講員的與談人有黎明教授、張小軼教授、陳慰祖教授、戚繼教授。中國科學院大學的周昕教授是這場次的第一位講員，他的講題是” Advanced simulations in biological polymers” ，周昕教授發展新的的演算法來計算生物分子的關聯。第二位講員是中華大學的黃俊燕教授，他的講題是” Structural patterns of disconnected functional network in Schizophrenia: a ROI-based model approach” ，黃俊燕教授利用 ROI 模型研究腦部的功連結。第三位講員是中國科學院大學的黎明教授，他的講題是” A theoretical model on the fidelity of biological information-copying process” ，黎明教授自行推導一系列模型與公式來模擬生物複製的過程。第四位講員是北京大學物理學院的李方廷教授，他的講題是” The budding yeast cell-cycle is a global attractive trajectory driven by sequential saddle-node bifurcations with ghost effects” ，李方廷教授使用 3-node yeast cell cycle model 來估算酵母菌 cell cycle 的 Cdk 的作用方式。第五位講員是中興大學的謝立青教授，他的講題是” Identification of promoter regions of intergenic microRNAs from next-generation transcriptome sequencing data” ，謝立青教授開發一 pipeline 並利用 TopHat, 且分析結合人類轉譯體序列資料來確認可能 miRNA 的調控子。



圖二十七：周昕教授



圖二十八：黃俊燕教授



圖二十九：黎明教授



圖三十一：李方廷教授



圖三十二：謝立青教授

6月27日下午第一場會議(論文摘要請參見手冊 S7-1~S7-5)的主持人是王存新教授，與談人分兩部份，前3位講員的與談人有郝柏林院士、李春華教授、韋廣紅教授、李方廷教授，後2位講員的與談人有鄭偉謀教授、史華林教授、王延頌教授、陳慰祖教授。第一位講員是復旦大學物理系的左光宏教授，他的講題是”LVTreeView: An Interactive Display of the All-Species Living Tre”，左光宏教授開發物種分類工具 LVTreeView，同時結合 taxonomy 與 phylogeny 來增加分類精確性。第二位講員是復旦大學生命科學學院的戚繼教授，他的講題是”使用突變體轉錄組研究 BAM1、BAM2 等關鍵基因在花藥早期細胞分化過程中的調控作用”。戚繼教授提到 BAM1/2 起源于十字花科分化前的一次基因組複製，且在所有5個十字花科植物中都被保留下來，暗示 BAM1/2 的保留對於這些植物進化適應性很重要。且研究說明這兩個基因存在功能的特異性，暗示他們出現功能分化。第三位講員是台灣大學的陸駿逸教授，他的講題是”The shape dynamics of the multi-lamellar vesicles”，陸駿逸教授研究在”multi-lamellar vesicle”時的”slow vesicle squeezing modes”是如何應用的。第四位講員是中央大學的吳立青教授，他的講題是”心臟外科手術之相關風險因子分析”。吳立青教授提到3種心臟外科手術，coronary artery bypass graft surgery, heart valve surgery 及 aortic surgery 可與家族資料，健康資料，病歷資料結合來預測最佳手術，降低死亡率。第五位講員是北京交通大學的紀豐民教授，他的講題是”原子水平蛋白質表面相互作用位點的統計研究”，紀豐民教授研究包括根據表面可及性面積和原子類型的頻率分布可以定義一個新的相互作用位點之傾向勢。該勢能函數具有明確的統計背景，結合蛋白質表面幾何學參數可以比較準確地在原子水平上預測蛋白質表面的相互作用位點。



圖三十三：左光宏教授



圖三十四：戚繼教授



圖三十五：陸駿逸教授



圖三十六：吳立青教授



圖三十七：紀豐民教授

6月27日下午最後一場會議(論文摘要請參見手冊 S8-1~S8-4)的主持人是黎壁賢教授，與談人分兩部份，前2位講員的與談人有左光宏教授、肖奕教授、舒咬根教授、王鵬業教授，後2位講員的與談人有劉澤先博士、戚繼教授、薛宇教授、陳雅毛女士。第一位講員是中國科學院理論物理研究所的王延頤教授，他的講題是”Molecular Origin of the Self-Assembled Morphological Difference Caused by Varying the Order of Charged Residues in Short Peptides”，王延頤教授開發物理模型”REMD”來解釋疏水性與靜電力的關係來模擬短 peptide 自我摺疊的狀況。第二位講員是復旦大學物理系的韋廣紅教授，她的講題是”Effects of carbon nanoparticles on the aggregation of Alzheimer’s b-amyloid peptide fragment”，韋廣紅教授使用 REMD 模擬 CNP 如何避免 Ab(16-22) b-sheet 的形成，同時 AFM 實驗來證實可抑制 CNP 之效果。第三位講員是中國科學院理論物理研究所的舒咬根教授，他的講題是”Master equation approach for a cross-bridge power-stroke model with a finite number of motors”，舒咬根教授自行開發生物奈米馬達，同時應用此技術來開發各種生物感測器與醫藥用途。第四位講員是中原大學的吳宗遠教授，他的講題是”以重組 DNA 技術產生具功能性之重組 RNA”，吳宗遠教授探討 IRES 結構與 RNA 表達的相關研究。晚宴設在禪園餐廳。



圖三十八：王延頤教授 圖三十九：韋廣紅教授 圖四十：舒咬根教授 圖四十一：吳宗遠教授

6月28日上午的第一場會議(論文摘要請參見手冊S9-1~S9-3)的主持人是肖奕教授，與談人有歐陽鐘燦院士、雷紅星教授、王存新教授、鄭偉謀教授。北京工業大學的李春華教授是這場次的第一位講員，她的講題是”基于彈性網絡模型的麥芽糖轉運蛋白變構路徑及關鍵位點的研究”，李春華教授所發展的一種基于彈性網絡模型的熱力學方法，識別出在麥芽糖轉運過程中起重要作用的一系列關鍵胺基，探討了這些胺基所介導的長程耦合效益。為蛋白質的功能改造和藥物設計提供有價值的生物學信息。第二演講是李弘謙老師的博士班學生-許梓亭、許爵麟、田雅馨、彭奕憲共4位，他們的講題是”Functional genomic studies and drug discovery for cancer stem cells, brain cancer, type 2 diabetes, and bipolar disorder”，這些博士生利用各種生資工具來分析功能基因體資料來研究癌幹細胞、腦癌、第二型糖尿病與躁鬱症。第三位講員是中原大學的史慶璞教授，他的講題是”Legal and Ethical Concerns on Stem Cell Research for Therapeutic Cloning Technology”，史慶璞教授從法律與道德的觀點來探討醫療複製的技術。



圖四十二：李春華教授 圖四十三：李弘謙老師的博士生 圖四十四：史慶璞教授

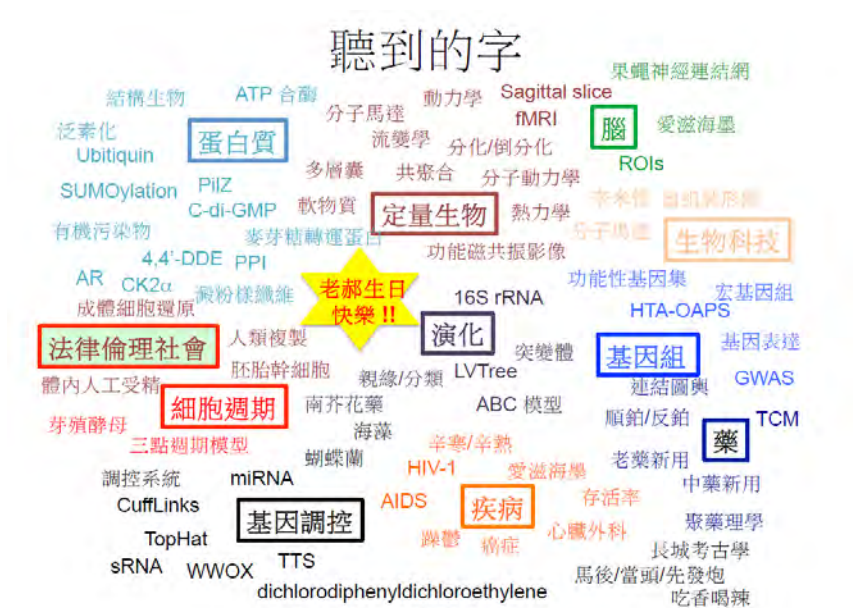
6月28日上午的第二場會議(論文摘要請參見手冊S10-1~S10-3)的主持人是鄭偉謀教授，與談人有雷紅星教授、史華林教授、郝柏林院士、王延頤教授。華中科技大學的劉澤先博士是這場次的第一位講員，他的講題是”Systematic analysis of the phosphoproteome and kinase substrate networks in the mouse testis”，劉澤先博士利用各種模型來分析磷酸化的蛋白質位置與其功能。第二位講員是中央大學的蘇彥碩博士，他的講題是”Suppressing collective motion of dense self-propelling rods by strongly coupled passive particles”，蘇彥碩博士採用各種數學公式來推導細菌得鞭毛的移動。最後一位講員是中原大學的陳中庸教授，他的講題是”A new tool for prediction of the internal

ribosomal entry site (IRES) secondary structure *in silico*”，陳中庸教授利用兩種模型的串連來提高 IRES 的生資預設的準確度，並以資料庫的資料來實證此系統可達 7 成以上的準確。



圖四十五：劉澤先博士 圖四十六：蘇彥碩博士 圖四十七：陳中庸教授

第九屆「海峽兩岸生物啟發的理論科學問題研討會」的最後由李弘謙教授主持，全體講員均一起參與討論。李弘謙教授以一張投影片來綜合所有的議題。



玖、其他（含效果評估及相關建議）

第九屆「海峽兩岸生物啟發的理論科學問題研討會」的發表論文有包含數學公式、物理模型來分析生物現象包括心血管疾病、癌症、系統生物學、演化學、細胞周期等；也有用物理原理建立新的生物工具或感測器，藉由各種不同學門的腦力激盪來解決單一學門無法做到的事，此研討會讓與會者均受益匪淺。感謝科技部、中央大學與中原大學的資助；建議科技部可以多部補助類似研討會，增加不同學門的學者的交流。