

---

# 研究人员提出通用结构对比新算法

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/34710.html>

*本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！*

研究人员提出通用结构对比新算法。蛋白质与核酸等生物大分子的三维结构比对是结构生物学和计算生物学中的核心任务之一，在功能注释、药物设计与进化研究中发挥着重要作用。近年来，深度学习结构预测模型和实验解析手段的迅猛发展，使高效、精准地对蛋白质、核酸及其复合物结构进行比对变得尤为关键。

然而，现有大多数比对工具往往仅支持特定类型分子的比对，难以胜任跨分子、非序列顺序、循环排列等复杂结构的统一处理，限制了其在多样化研究场景中的应用。

近日，中国科学院深圳先进技术研究院研究员张成辛，联合密歇根大学教授Lydia Freddolino、新加坡国立大学教授张阳团队在《自然—协议》（Nature Protocols）上发表最新研究成果，系统介绍了他们开发的通用结构比对工具US-align。该算法支持蛋白质、DNA、RNA及其复合物的快速统一比对，具备命令行、PyMOL插件和网页服务器三种使用方式。

US-align算法构建于张阳团队早期提出的TM-score和TM-align基础上，后者已广泛用于蛋白质结构质量评估和结构比对任务。与之相比，US-align不仅支持蛋白，还扩展至核酸、蛋白-核酸复合物甚至小分子的比对，并于2022年发表于《自然—方法》。相较于2022年发表的纯命令行版本，新版US-align功能实用性和用户体验上有显著扩展和增强，新增了循环排列结构比对模块，支持多结构比对任务，增强了结果可视化能力。

此外，作为一款可同时完成序列顺序的结构比对与非序列顺序比对的算法，最新版本的US-align还创新性地开发一套全新的循环排列结构比对算法，是第一款基于TM-score打分函数的循环排列比对程序。该算法还支持批量结构比对，为三维结构数据库搜索提供便利。

---

US-align 是目前少数可同时处理单体、复合物、多结构、序列和非序列顺序比对，以及循环排列比对任务的通用结构工具。它以统一的TM-score打分函数描绘蛋白与核酸结构间的相似性，并配套多种可视化和批量处理功能，为科研人员提供了高效、灵活、直观的结构分析平台。

研究团队介绍，US-align最新版相比2022年的命令行版本进行了多重优化，但目前对于构象变化较大的蛋白与核酸结构，US-align尚未能进行有效的柔性结构比对，开发新型的柔性结构比对算法将是US-align平台的未来研发方向之一。（来源：中国科学报 刁雯蕙）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1038/s41596-025-01189-x>

作者：张成辛等 来源：《自然—协议》

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](https://www.iikx.com)转发