

NOBELPRISET I KEMI 2024
THE NOBEL PRIZE IN CHEMISTRY 2024David Baker
University of Washington
USA

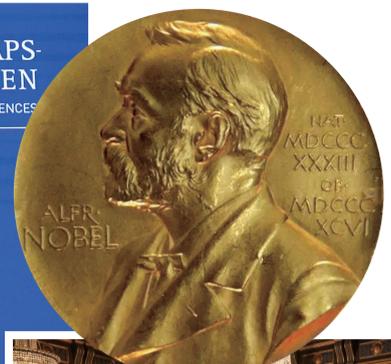
"för datorbaserad proteindesign"

"for computational protein design"

Demis Hassabis
Google DeepMind
United Kingdom

"för proteinstrukturprediktion"

"for protein structure prediction"

John M. Jumper
Google DeepMind
United Kingdom10月9日,在瑞典斯德哥尔摩举行的2024年诺贝尔化学奖公布现场
新华社发

2024年诺贝尔化学奖得主(从左到右)美国华盛顿大学的戴维·贝克、英国伦敦谷歌旗下人工智能公司“深层思维”的德米斯·哈萨比斯和约翰·江珀 新华社发

诺贝尔化学奖也跟 AI 有关
三位蛋白质结构预测领域科学家分享奖项

未来,人们谈起2024年的诺贝尔奖,或许会将其命名为“诺奖AI年”。继物理学奖颁给两位“AI教父”之后,化学奖又颁给了与人工智能密切相关的科学家。

当地时间10月9日,瑞典皇家科学院宣布,将2024年诺贝尔化学奖授予戴维·贝克(David Baker)、德米斯·哈萨比斯(Demis Hassabis)和约翰·江珀(John M. Jumper),以表彰他们在蛋白质设计和蛋白质结构预测领域作出的贡献。3名获奖者共获得1100万瑞典克朗(约合745万元人民币)奖金。

现代快报/现代+记者 于露 是钟寅 李鸣 李楠 综合央视新闻、新华社

人工智能节省确定蛋白质结构的时间

蛋白质,一直是诺贝尔化学奖青睐的研究方向。蛋白质是执行生命功能的最重要的生物大分子,是生命的重要组成部分,也是化学家研究的重要对象,例如消化食物所需要的酶就是一种蛋白质。

但以往的化学研究主要靠猜测、尝试、纠错,再猜测、再尝试……在这种研究范式下,科研人员必须在不断试错的过程中取得发现,研究效率低、成本高。随着化学研究对象日益复杂化、高维化,面对庞大的化学空间,配方和工艺的搜索常常止步于局部最优,无法进行全局探索。

数据驱动的人工智能给化学研究带来不同的可能性。诺贝尔奖官方表示,2024年诺贝尔化学奖的主题是蛋白质——生命中巧妙的化学工具。来自美国华盛顿大学的贝克成功完成了构建全新蛋白质这一几乎不可能完成的任务;而来自谷歌的英国科学家哈萨比斯和江珀则开发了一种名为AlphaFold2的人工智能模型,这种模型解决了一个已有50年历史的难题,能够预测大约两亿种已知蛋白质的复杂结构,并且已被全球200多万人使用。这些发现具有巨大的潜力。

据介绍,蛋白质由20种不同的氨基酸组

成,这些氨基酸可以被视作生命的构建模块。2003年,贝克成功利用这些模块设计出一种全新蛋白质。他开发了著名的Rosetta软件,极大地推动了蛋白质结构预测的进展。从那时起,他的研究团队创造了一个又一个富有想象力的蛋白质,包括可用于药物、疫苗、纳米材料和微小传感器的蛋白质。同时,他还将深度学习技术引入Rosetta软件,并率先公开RoseTTAFold的源代码。

哈萨比斯和江珀则是主导了人工智能模型AlphaFold的开发。哈萨比斯是英国伦敦谷歌旗下人工智能公司“深层思维”(DeepMind)的创始人兼首席执行官,同时也是AlphaFold项目的负责人。江珀则是AlphaFold项目的首席高级研究员。如今,AlphaFold改进系统AlphaFold2,已经对超过2亿种蛋白质进行了结构预测——几乎是科学界已知的所有蛋白质。这2亿种蛋白质的结构预测数据向公众免费开放,使研究人员能够像使用谷歌搜索信息一样搜索蛋白质的结构,为研究人员即时提供他们正在研究的任何蛋白质的预测模型,大大减少了他们曾经需要花在确定蛋白质结构上的时间。

中国科学家已将AI应用到化学科研领域

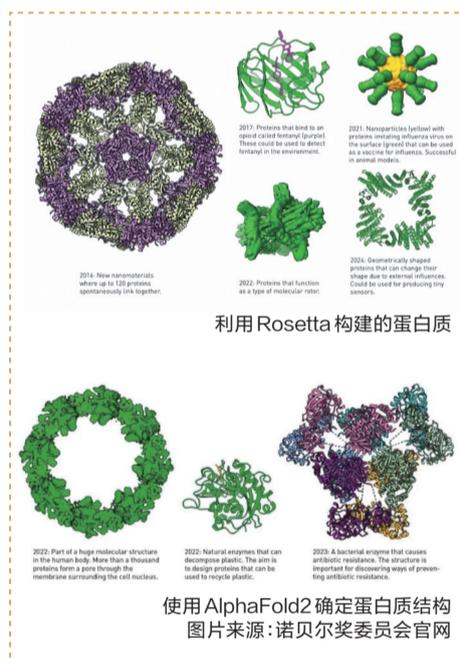
2024年的诺贝尔化学奖和物理学奖,都与人工智能有关。这是否反映出未来科研的新风向?

南京大学化学化工学院教授、博导郑鹏主要从事化学和生物学交叉的前沿科学研究领域,他向现代快报记者解释了人工智能在化学领域的应用。“2024年诺贝尔化学奖得主戴维·贝克近几十年来一直从事蛋白质设计研究,设计出自然界中不存在的蛋白质分子,使其具有更好的功能或新颖的结构。”郑鹏介绍,蛋白质由氨基酸排列组合而成,设计难度非常高,最近5至10年里伴随着人工智能的发展,贝克将人工智能引入到蛋白质设计领域,使得蛋白质设计得到了质的飞跃,设计出了很多具有应用价值的蛋白质。

郑鹏说,蛋白质是由氨基酸线性排列组

合构成,但绝大部分蛋白质只有具备正确的三维结构才能行使功能,如何预测和得到蛋白的三维结构对科学家来说是一个很大的难题。而来自谷歌的德米斯·哈萨比斯和约翰·江珀两位科学家,通过开发AlphaFold人工智能模型,实现了根据氨基酸序列准确预测蛋白质结构的突破,“结构知道了,对应的功能也就能知道”。

两组科学家从不同的方向来研究蛋白质领域,为什么他们的研究如此重要呢?郑鹏举例说:“如果我们能准确预测蛋白质结构,设计相应的蛋白质和分子,那么就可以根据癌症相关的蛋白,改造已有的蛋白,设计靶向药物,所以说他们的研究意义是非凡的,在人类生命健康领域有重要的应用,他们获得诺贝尔化学奖是众望所归。”



利用 Rosetta 构建的蛋白质

使用 AlphaFold2 确定蛋白质结构
图片来源:诺贝尔奖委员会官网

新闻链接

此前5年
诺贝尔化学奖得主名单

2023年

诺贝尔化学奖授予美国麻省理工学院教授蒙吉·G·巴文迪(Moungi G. Bawendi)、美国哥伦比亚大学教授路易斯·E·布鲁斯(Louis E. Brus)和美国纳米晶体技术公司前首席科学家阿列克谢·伊基莫夫(Alexei Ekimov),以表彰他们在发现和合成量子点(quantum dots)方面作出的贡献。

2022年

诺贝尔化学奖授予美国科学家卡罗琳·贝尔托西(Carolyn R. Bertozzi)、丹麦科学家摩顿·梅尔达尔(Morten Meldal)和美国科学家卡尔·巴里·夏普利斯(K. Barry Sharpless),以表彰他们在点击化学和生物正化学研究方面的贡献。

2021年

诺贝尔化学奖授予德国科学家本杰明·李斯特(Benjamin List)和美国科学家戴维·麦克米伦(David MacMillan),以表彰他们对不对称有机催化的发展所作出的贡献。

2020年

诺贝尔化学奖授予法国科学家埃马纽埃尔·卡彭蒂耶(Emmanuelle Charpentier)和美国科学家詹妮弗·杜德纳(Jennifer A. Doudna),以表彰她们在“凭借开发基因组编辑方法”方面作出的贡献。

2019年

诺贝尔化学奖授予美国科学家约翰·古迪纳夫(John B. Goodenough)、英国化学家斯坦利·威廷汉(M. Stanley Whittingham)和日本科学家吉野彰(Akira Yoshino),以表彰他们在锂离子电池领域的贡献。

综合