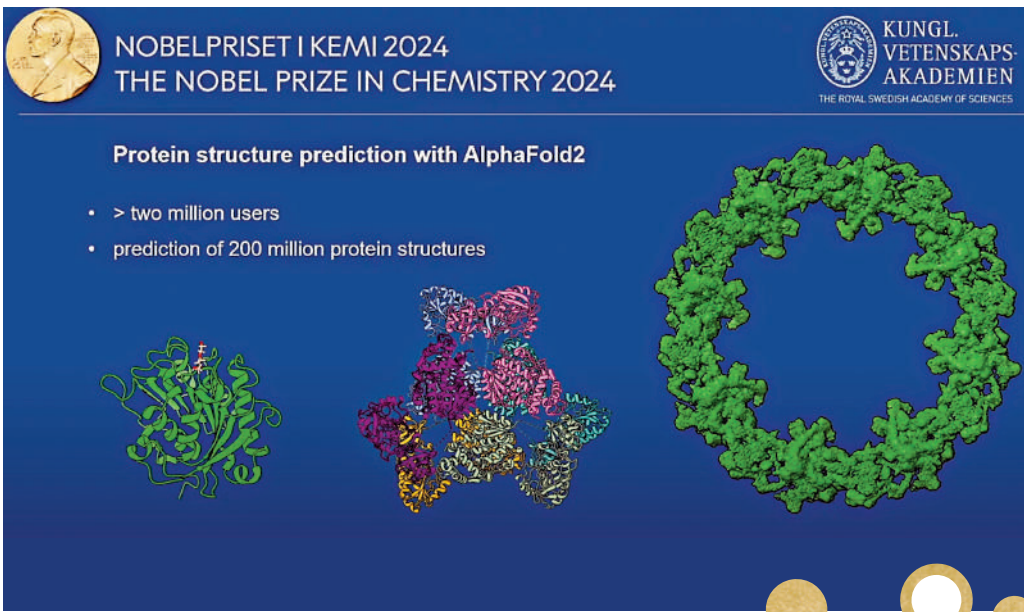


破解蛋白質密碼 三傑分享化學諾獎

哈薩比斯及江珀開發AI模型 引發生命科學界地震



▲諾貝爾獎官網9日介紹可預測蛋白質結構的AlphaFold2模型。

戴維·貝克 (David Baker)



1962年出生於美國西雅圖，1989年獲加州大學伯克利分校博士學位，現為美國華盛頓大學教授。

德米斯·哈薩比斯 (Demis Hassabis)



1976年出生於英國倫敦，2009年獲倫敦大學學院博士學位，谷歌DeepMind創始人之一兼行政總裁，亦是AlphaGo之父。

約翰·江珀 (John M. Jumper)



1985年出生於美國阿肯色州小石城，2017年獲芝加哥大學博士學位，現為谷歌DeepMind資深科學家。

瑞典皇家科學院9日宣布，將2024年諾貝爾化學獎授予美國科學家貝克，以及英國倫敦人工智能(AI)公司谷歌DeepMind的哈薩比斯和江珀，以表彰他們在蛋白質設計和蛋白質結構預測領域作出的貢獻。貝克成功構建了全新種類的蛋白質，哈薩比斯和江珀開發出AI模型，解決困擾科學界50年的蛋白質結構預測難題。他們的研究成果已被廣泛應用於製藥、疫苗、納米材料等領域。

【大公報訊】瑞典皇家科學院9日宣布，2024年諾貝爾化學獎一半授予貝克，以表彰他在蛋白質設計領域的貢獻；另一半共同授予哈薩比斯和江珀，以表彰他們在蛋白質結構預測方面的貢獻。貝克1962年出生於美國西雅圖，現為美國華盛頓大學教授。哈薩比斯1976年出生於英國倫敦，是DeepMind創始人之一兼行政總裁，亦是圍棋程式AlphaGo之父。江珀1985年出生於美國阿肯色州小石城，現為DeepMind資深科學家。

評獎委員會表示：「他們破解了蛋白質奇妙結構的密碼。貝克成功完成一項幾乎不可能的壯舉，製造出全新種類的蛋白質。哈薩比斯和江珀開發出AI模型來解決預測蛋白質複雜結構的問題。這些發現蘊藏著巨大潛力。」

全新蛋白質用途廣泛

蛋白質控制和驅動所有的化學反應，構成生命的基礎。蛋白質通常由20種不同的氨基酸組成，這些氨基酸可以被看做構建生命的「積木」。貝克和他的同事們開發出軟件工具Rosetta，用於給蛋白質結構建模，並設計新的蛋白質。2003年，貝克用氨基酸「積木」成功設計出了一種前所未有的新蛋白質。此後，他的團隊不斷發揮創意，創造了一種又一種蛋白質，可用於構建納米材料、檢測芬太尼、製作流感疫苗等。

氨基酸以長串形式連接在一起(即氨基酸序列)，摺疊起來形成三維結構，決定蛋白質的功能。20世紀70年代以來，研究人員一直試圖通過氨基酸序列預測蛋白質結構，但這項工作極為困難。2018年，DeepMind推

出AlphaFold，贏得兩年一度的蛋白質結構預測大賽CASP。2020年，哈薩比斯和江珀主導開發的AlphaFold2在生命科學界引發一場地震，其對蛋白質結構的預測非常精準。

AlphaFold2能夠預測大約2億種已知蛋白質的複雜結構，可以幫助研究人員更好地了解抗生素抗藥性、構建分解塑膠的酶的圖像等。全球已有超過200萬人使用該模型。今年5月，DeepMind在《自然》期刊上介紹了新一代模型AlphaFold3。據悉，該模型可預測所有生命分子的結構和相互作用，包括蛋白質、DNA、RNA等。

今年諾獎的AI色彩濃厚

哈薩比斯接受諾獎官方電話採訪時說，獲獎喜訊令他不置信，「大腦一片空白」。作為70多年來最年輕的化學諾獎得主，江珀同樣興奮不已。他表示，自己原本認為獲獎機會只有10%，因此決定蒙頭大睡，直到結果揭曉。但這個計劃最終失敗，因為他根本睡不着。江珀還表示，現代社會事情發展得很快，「從論文到諾獎只需要3至4年」。

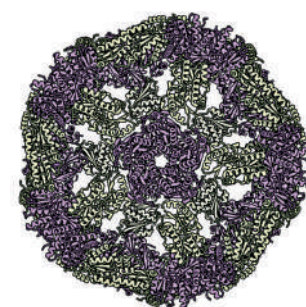
今年諾獎的AI色彩濃厚，8日揭曉的物理學獎聚焦為AI技術奠基的人工神經網絡，得主之一是「AI教父」欣頓。欣頓發表獲獎感言時再次強調對AI技術可能失控的擔憂。但哈薩比斯顯然更加樂觀。他表示，至少在可以預見的未來，AI將是提高科學家工作效率的工具。哈薩比斯強調，AI擅長分析數據，但不知道如何提出正確的問題或作出假設，這部分工作還是要依靠人類。

(綜合報道)

得獎成果

2024年諾貝爾化學獎一半授予貝克，以表彰其在計算蛋白質設計方面的貢獻；另一半共同授予哈薩比斯和江珀，以表彰他們在蛋白質結構預測方面的貢獻。2003年，貝克成功構建了一種全新的蛋白質。此後，他的研究團隊構建了一種又一種蛋白質，可應用於製藥、疫苗、納米材料等多個領域。2020年，哈薩比斯和江珀開發出名為AlphaFold2的人工智能(AI)模型，能夠預測大約2億種已知蛋白質的複雜結構，可以幫助研究人員更好地了解抗生素抗藥性、構建分解塑膠的酶的圖像等。全球已有超過200萬人使用該模型。

貝克團隊構建的部分蛋白質



2016年 多達120個蛋白質連接在一起，構成新的納米材料

2017年 可與芬太尼(紫色部分)結合的蛋白質，用於檢測環境中的芬太尼

2022年 可充當分子轉子(人工分子機器的重要構件)的蛋白質

2021年 模擬流感病毒的蛋白質(綠色)附着在納米顆粒(黃色)上，可用於製作流感疫苗

2024年 可用於製造微型感測器的蛋白質

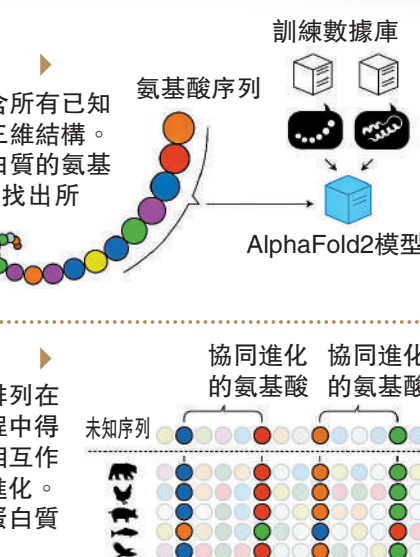
AlphaFold2工作原理

1.接收新數據並檢索數據庫

AlphaFold2的訓練數據庫包含所有已知氨基酸序列及已確定的蛋白質三維結構。向該模型輸入一種未知結構蛋白質的氨基酸序列，它便會檢索數據庫，找出所有類似的氨基酸序列和蛋白質結構。這些氨基酸序列通常來自不同物種。

2.分析氨基酸序列

該模型將找到的氨基酸序列排列在一起，分析哪些部分在進化過程中得以保留、哪些氨基酸之間存在相互作用。相互作用的氨基酸會協同進化。通過分析，該模型預測出未知蛋白質結構中不同氨基酸之間的距離。



3.AI迭代計算 該模型進行迭代計算，不斷完善對氨基酸序列的分析。

4.得出蛋白質結構預測 基於以上計算結果，該模型預測出蛋白質結構。

來源：諾貝爾獎官網

私企vs校園 諾獎得主曾「內戰」

【大公報訊】據《自然》網站報道：諾貝爾獎官網9日採訪哈薩比斯時提出一個問題：今年一半的化學諾獎屬於私企DeepMind，而不是一所大學，這會造成什麼影響嗎？哈薩比斯回答說，只要走在正確的道路上，無論在私企還是校園都可以做好科研。事實上，今年3位化學諾獎得主之間已經進行了一場學術界和商業公司之間的競賽。

《自然》網站指出，在哈薩比斯和江珀主導開發的AlphaFold2一鳴驚人之前，貝克的軟件Rosetta是最出色的蛋白質結構預測工具之一，且也引入了AI技術。由於AlphaFold2屬於私企，很多科學家曾擔憂無法自由使用該模型。DeepMind當時發表演講，闡述AlphaFold2的工作原理，包括其使用的深度學習技術。貝克團隊從中受到啟發，推出同樣使用該技術

的RoseTTAFold，其表現幾乎與AlphaFold2不相上下。2021年以來，兩款模型均不斷完善。

2021年，貝克和哈薩比斯先後宣布各自的模型將開源。2021年7月15日，《科學》和《自然》兩大期刊在同一天分別發表了RoseTTAFold和AlphaFold2的技術論文。有分析認為，這是利用競爭推動「技術平權」的一個經典案例。

美司法部考慮拆分谷歌打擊壟斷

【大公報訊】據《華爾街日報》報道：美國司法部8日向一家聯邦法院提交文件，表示正考慮拆分科技巨頭谷歌，以解決其在搜索引擎領域佔據壟斷地位的問題。美媒指出，美國反壟斷機構40年來從未拆分過任何一家公司，若此次真的對谷歌下手，將創造新的先例，使拆分補救措施擁有更大合法性。

美國司法部8日在文件中表示，政府正在考慮使用「一系列全面工具」來恢復競爭，包括對谷歌業務進行「結構性調整」。一名法官8月裁定，谷歌通過向網絡瀏覽器運營商和手機製造商支付數十億美元，讓它們將谷歌設為默認搜尋引擎，從而鞏固其壟斷地位。司法部將在11月20日前就此案提出具體解決方案。

谷歌在另一宗反壟斷起訴中也面臨拆分風險。美國司法部反壟斷部門去年1月提起訴訟，指控谷歌收購了威脅其在廣告市場上壟斷地位的初創公司，並要求拆分谷歌的廣告技術業務。此案上月開審，法官可能還需要幾個月才會作出裁決。



▲美國司法部考慮拆分谷歌。圖為美國加州的谷歌辦公大樓。

朝鮮切斷與韓國連接的公路和鐵路

【大公報訊】綜合新華社、韓聯社報道：朝鮮人民軍總參謀部9日宣布，朝方將從即日起完全切斷與韓國連接的公路和鐵路，以維護國家安全。中國外交部發言人毛寧表示，中方關注半島局勢的發展演變和朝韓關係的相關動向，維護朝鮮半島和平穩定需要各方共同做出努力。



▲朝鮮9日宣布切斷與韓國連接的公路和鐵路。圖為韓國在朝韓邊境設置的路障。

朝鮮人民軍總參謀部表示，與朝方南部國境交界的韓國地區無時無刻不在進行侵略戰爭演習，加之一批批美國核戰略資產隨時出沒，好戰狂人常常叫囂朝鮮「政權終結」。朝鮮半島出現的嚴峻軍事形勢要求朝方堅決採取更強硬的反制措施來切實維護國家安全。針對南部國境一帶一觸即發的戰爭危機，朝方「將採取實質性軍事措施徹底分離朝鮮的主權行使領域和韓國的領土」，當務之急是完全切斷與韓國連接的朝方地區公路和鐵路，進行防禦設施要塞化加固工程。

朝方表示，為避免誤判、防止擦槍走火，已於9日9時45分就此事對美國軍方進行了電話通知。韓國聯合參謀本部9日稱，韓軍「絕不會坐視朝鮮企圖單方面改變現狀的任何行徑」，由此造成的一切後果完全由朝方承擔。

毛寧表示，中方認為維護朝鮮半島和平穩定，推動半島問題政治解決進程符合各方的共同利益，也是國際社會的普遍期待，這需要各方共同為此做出努力。