



WEIZMANN
INSTITUTE
OF SCIENCE

Department of
Science Teaching
המחלקה
להוראת המדעים

מרכז מורים ארצי
למו"ט בחס"ב
המקום להתפתחות מקצועית



מינהלת מל"מ
המרכז הישראלי לחינוך מדעי-טכנולוגי
ע"ש עמוס דה-שליט



משרד החינוך
המזכירות הפדגוגית
אגף מדעים
הפיקוח על מדע וטכנולוגיה



מעוזר חכם לפסגת המדעים - AI הגיע גם לפרסי נובל



השנה (2024) יקבלו חמישה מדענים את התואר המפואר "זוכי פרס נובל" בשני תחומים מדעיים: כימיה (שלושה מדענים) ופיזיקה (שני מדענים).

מבנה החלבון מוגדר במספר מימדים:

1. מבנה ראשוני (Primary Structure):

המבנה הראשוני של חלבון הוא רצף חומצות האמינו שמרכיבות אותו. חומצות האמינו קשורות ביניהן בקשרים פפטידיים (קשרים כימיים בין קבוצה אמינית של חומצה אחת לקבוצה קרבוקסילית של חומצה אחרת).

2. מבנה שניוני (Secondary Structure):

המבנה השניוני מתאר את הקיפולים המקומיים של רצף חומצות האמינו, הנוצרים בזכות קשרים מימניים בין אטומים בשרשרת החלבון. הצורות העיקריות הן: סלילי אלפא ומשטחי ביתא. המבנה השניוני מעניק לחלבון יציבות מקומית ומבנה מסודר.

3. מבנה שלישוני (Tertiary Structure):

המבנה השלישוני מתאר את הקיפול התלת-ממדי הכולל של החלבון כולו. הוא נקבע על ידי אינטראקציות בין קבוצות צד של חומצות האמינו, כמו:

- קשרים הידרופוביים והידרופיליים.
- קשרים דיסולפידיים (קשרים כימיים חזקים בין גופרית בשיירי ציסטאין).
- קשרי מימן ואינטראקציות יוניות.

4. מבנה רבעוני (Quaternary Structure):

מבנה רבעוני קיים בחלבונים המורכבים מיותר משרשרת פוליפפטידית אחת. זהו הסידור המרחבי של תתי-יחידות זו ביחס לזו. לדוגמה, ההמוגלובין, שמורכב מ-4 תת-יחידות (2 אלפא ו-2 בטא), הוא בעל מבנה רבעוני.

מספר החלבונים שכבר נחקרו ואנו יודעים את צורתם אינו קטן. מבנה החלבונים אשר נמצאו פוענחו באמצעות שימוש במיקרוסקופ אלקטרוני, תהודה מגנטית גרעינית או דיפרקציית קרני - X. כך, למשל, [פנחה פרופ' עדה יונת את מבנה הריבוזום](#). בשנים האחרונות, נכנסה הבינה המלאכותית ל'עסקי החלבונים' ומשתמשים בה כדי למדל מבנים מסובכים בעזרת פחות משאבים.

הפרס בפיזיקה יוענק על ממצאים וחידושים בתחום "למידת מכונה" (Machine learning) המאפשרים למחשבים ללמוד בעזרת רשתות נוירונים מלאכותיות. **הפרס בכימיה** גם קשור לנושא "למידת מכונה" בכך שהוא עוסק בחישוב וחיזוי של מבני חלבונים מסובכים על ידי בינה מלאכותית. שני נושאים אלו בנויים בבסיסם על מודלים חישוביים המאפשרים חיזוי / חישוב של משוואות מסובכות אשר לאדם יקח המון זמן (הרבה יותר מאשר זמן חיים ממוצע) לחשב.

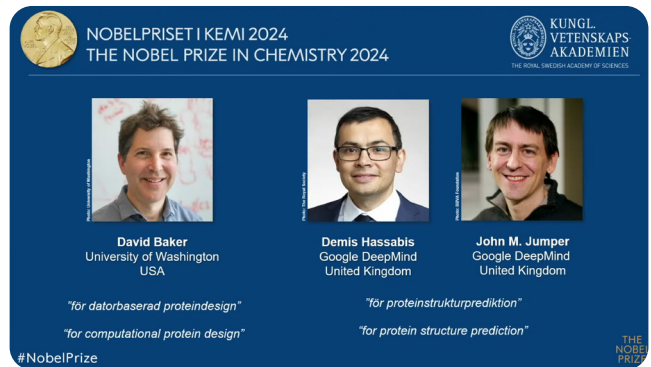
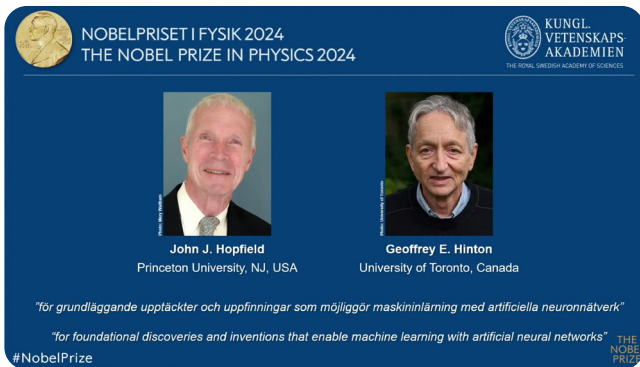
ניצד עובדת בינה מלאכותית (AI = Artificial Intelligence)?

ניקח, לדוגמה, תינוק שעכשיו לומד לדבר. נראה לו כדור ונגיד לו "זה כדור". תחילה, יחשוב התינוק שהחפץ הספציפי הזה שמו "כדור". התינוק לא ידע להכליל את המילה כדור לכל חפץ בצורה ספירית שאפשר לשחק בו מסירות. לאחר שנראה לו מספיק כדורים, יבין התינוק שלא קוראים לכל החפצים האלו "כדור" במקרה, אלא כל מה שנראה כך הוא בעצם החפץ כדור. כך למד התינוק מה זה כדור וכך לומדת בינה מלאכותית, איך נראים חפצים בתמונה, איך מנוסח משפט בצורה נכונה, מה תהיה התחזית מחר, מתי כדאי להשקיע כסף במניה מסוימת, כיצד תראה משוואה של תנועה בליסטית ואיך מתקבלים חלבונים במרחב. בשלב האימון של המכונה מספקים לה דוגמאות רבות מהן היא "לומדת" את המושג בו מעוניינים. לאחר מכן מגיע שלב הבחינה - בה מוצגות למכונה דוגמאות, אנטי דוגמאות ואף מושגים שאינם קשורים על מנת לבחון ולשפר את מידת הדיוק של ההמשגה.

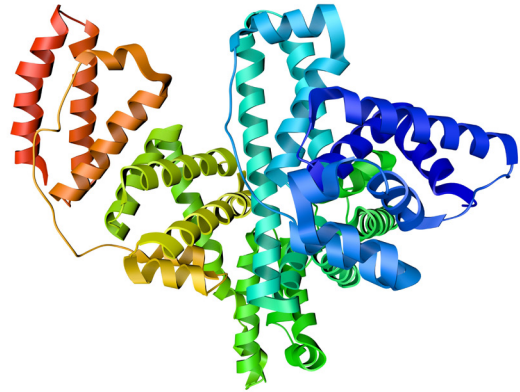
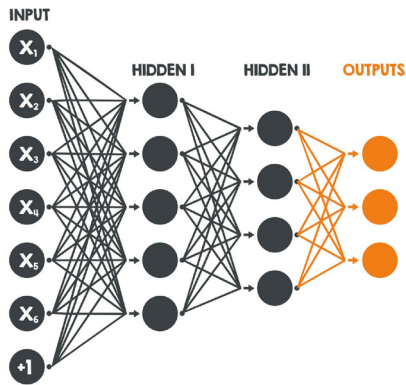
אז איך קשורה בינה מלאכותית לפרסי נובל השנה?

בכדי להבין את פרס נובל בכימיה נצטרך לצלול לעולמם של החלבונים. תחום שלם במדעי החומר והחיים חוקר את תפקידם של החלבונים השונים במערכות חיים. לצורך כך, עלינו להבין איך חלבונים בנויים, איך הם מתקבלים ואילו מבנים תלת ממדיים הם יוצרים.

חלבון הוא פולימר (שרשרת) הבנויה מיחידות חוזרות של חומצות אמינו. לכל חלבון בתא תפקוד ייחודי משלו.



ARTIFICIAL NEURAL NETWORK



ANN מדמה את מעברי המידע במוח בכך שניורונים מעבירים מידע אחד לשני. בין ניורונים עובר מידע כימי וחשמלי חסר משמעות כשלעצמו (במקרה של מחשב מדובר במטריצות עם המון מספרים שונים וחסרי משמעות כל אחד כשלעצמו).

רשת ניורונים מורכבת ממספר רב של "תאי בסיס" שהם יחידות חישוב בדידות, כך שכל תא בסיס מבצע חישוב פשוט יחסית. לכל תא מספר כניסות ויציאה אחת שערכה הוא פונקציה כלשהי של הכניסות. יציאה של תא מסוים יכולה להזין מספר כניסות של תאים שונים. מודל מאומן של ANN יכול להגיע לסדר גודל של עשרות אם לא מאות של שכבות, כל שכבה מורכבת ממטריצת משקלים כאשר כל משקל במטריצה מדמה ניורון. ברשתות ניורונים מתבצעת מעין חלוקת עבודה כשהשכבה האחרונה נועדה להחזיר את המידע המעובד כפלט. כך למשל יכולה רשת ניורונים בסופו של דבר לבצע תהליך מורכב כגון זיהוי פנים בתמונה.

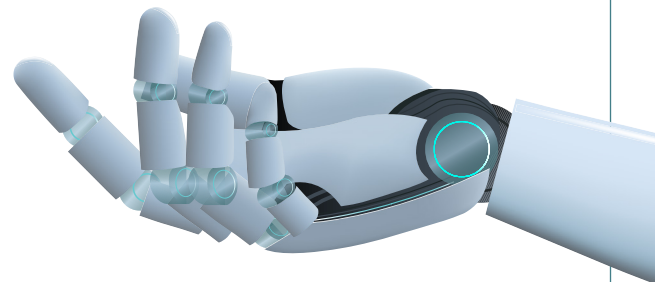
לרשתות ניורונים מלאכותיות תחומי יישום רבים בכל תחום הדורש ניתוח נתוני עתק. לדוגמה:

- בתחום הפיננסי (לדוגמה – חיזוי של ערך מניה, חיפוש אנומליות לטובת זיהוי זיופים וכיוצא באלו)
- בפענוח הדמיות רפואיות ובדיאגנוסטיקה רפואית, בהגנת סייבר ולבסוף גם בתחום בו פתחנו
- כימואינפורמטיקה: פענוח וחיזוי מבנה ותכונות של תרכובות כימיות, כמו חלבונים.

שלישית המדענים דוד בייקר (David Baker), דמיס הסביס (Demis Hassabis) וג'ון ג'מפר (John Jumper) פיתחו מודל ממוחשב שיכול לחזות מבנה של החלבון ואת צורת קיפולו מתוך רצף חומצות האמינו ממנו הוא בנוי. פריצת דרך לא קטנה בכלל והיא לא היחידה. זאת משום שבנוסף לכך הם גם הצליחו לפתח תהליך הפוך. מציאת רצף החומצות מתוך מבנה החלבון. תהליכים אלו יהפכו את תחום חקר החלבונים, לפשוט יותר, זמין יותר ומהיר יותר. מידע שלפני כן נדרשו שנים, כוח אדם רב והמון משאבים כדי להשיגו, נמצא בכף ידו של החוקר.

התחום השני בו יוענקו פרסי נובל השנה הוא פיזיקה.

בהמשך להתייחסות לבינה מלאכותית, אי אפשר לשכוח את העובדה שאנו מנסים ללמד מכונה "לחשוב" כמו בן אדם. המדענים ג'ון הופפילד (John Hopfield) וג'פרי הינטון (Geoffrey Hinton) הגיעו לפריצת דרך בתחום של רשתות ניורונים מלאכותיות (Artificial Neural Networks - ANN).



נתיבה: סהר גרובר | גרפיקה: מור מוריה-שיפוני | האורים נלקחו ברישיון מאתר Shutterstock

המידעון נכתב במסגרת פרויקט של מרכז מורי מו"ט חט"ב מופעל על ידי מכון ויצמן למדע עבור משרד החינוך במסגרת מכרז מס' 22/11.2020